●理论物理学专题丛书

●曾谨言

量子力学专题分析

（下）





高等教育出版社

O413.1
Z04-5
2

443259

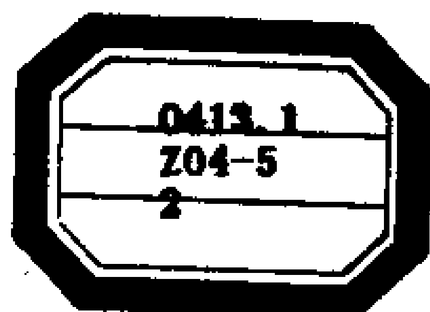
理论物理学专题丛书

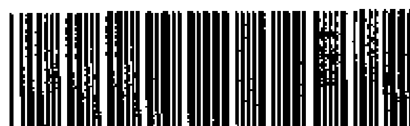
量子力学专题分析

（下）

曾谨言







高等教育出版社

443259

(京)112号



图书在版编目(CIP)数据

量子力学专题分析(下)/曾谨言编.—北京:高等教育出版社,1999
(理论物理学专题丛书)
ISBN 7-04-006873-7

Ⅰ.量… Ⅱ.曾… Ⅲ.量子力学 Ⅳ.0413.1

中国版本图书馆CIP数据核字(98)第20166号

出版发行	高等教育出版社		
社　　址	北京市东城区沙滩后街55号	**邮政编码**	100009
电　　话	010—64054588	**传　　真**	010—64014048
网　　址	http://www.hep.edu.cn		
经　　销	新华书店北京发行所		
印　　刷	国防工业出版社印刷厂		
开　　本	850×1168　1/32	**版　　次**	1999年6月第1版
印　　张	8.25	**印　　次**	1999年6月第1次印刷
字　　数	210 000	**定　　价**	8.30元

凡购买高等教育出版社图书,如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请在所购图书销售部门联系调换。

版权所有　侵权必究



内 容 简 介

本书内容大致可分为两类：一类涉及量子力学基本概念和原理，而在一般教材中很少谈及；另一类涉及量子力学在各前沿领域中的应用和新进展．本书前三章涉及量子力学中的相位问题，包括 Lewis 相、Berry 相、AA 相、AB 效应、Landau 能级和重力相移等．第 4 章介绍超对称量子力学方法．第 5 章讲述中心力场中的径向 Schrödinger 方程的因式分解和四类升、降算符．第 6 章介绍谐振子相干态．第 7 章讲述密度矩阵．全同粒子体系波函数的置换对称性是否是量子力学一条基本原理，将于第 8 章中讨论．第 9 章讨论一维势阱的透射振幅的极点与束缚能级的关系．

本书可作为高等学校物理类专业本科生、研究生和教师的教学参考书，以弥补一般教材的不足．本书也是科研工作者的一本有用的参考书．

序　言

《量子力学专题分析》(上)于1990年问世以来,受到各界读者欢迎,认为这种类型的教材对于提高目前国内高校的量子力学教学水平很有帮助.很多读者建议,其它几门理论物理课最好也能出版类似的专题分析.据悉,高教出版社也计划组织出版电动力学、统计物理等专题分析.还有一些读者来函,希望本书下册能尽快出版.但迟至今日,才得以脱稿.主要原因是写这类教材,不仅需要实际的教学经验,还要求作者在与该学科有关的前沿领域有较长期的科研经历,否则很难做到合适的选材和中肯的分析.

与上册相似,书中内容大致可分为两类:一类涉及量子力学基本概念和原理的问题,而在一般教材中很少谈及.另一类则涉及量子力学在各前沿领域中的应用和新进展.这些内容对于基础理论课教材的现代化和培养跨世纪人材是很必要的.

本书前三章内容都涉及概率波幅中的相位.Dirac曾经指出,相位是导致原子世界中一切干涉现象的根源,其涵义至深,且隐晦难解.应该说,一般教材中对相位的阐述是相当肤浅的.例如,关于相位不定性(phase uncertainty)问题以及含时力学量的本征态的相位不定性与自然界中量子态(包括相位)随时间的演化规律的关系,并不是很多人都很清楚.关于相位相干性消失(decoherence)问题的研究,仍处于初期阶段.这是介观物理中特别关注的问题,也涉及量子力学与经典力学的关系这个根本问题.电磁场矢势 $\boldsymbol{A}$ 和标势 φ,在经典电动力学中只是作为计算电磁场强度的方便的数学工具而引进的.带电粒子受力(Lorentz力)只依赖于电磁场强度,所以人们认为 $\boldsymbol{A}$ 和 φ 本身并无什么物理实在性.在量子力学中则不然.它在基本方程(Schrödinger方程)和波函数的相位中都不可

避免地出现矢势和标势.在 Feynman 路径积分理论中,传播子的相位也不可避免地出现 $\boldsymbol{A}$ 和 φ.矢势 $\boldsymbol{A}$ 的物理实在性已通过它对相移的影响所产生的干涉现象得以证实(AB 效应).重力势所导致的相移,也已在干涉实验中被证实.事实上,近年来量子力学在各前沿领域中的新进展,大多涉及相位问题.

第 4、5 两章涉及超对称量子力学方法.但与量子场论中讲述超对称性的侧重点不同,第 4 章中只是把它作为非相对论量子力学中求解一维体系的能量本征值问题的方法来介绍,实际上是 Schrödinger 处理谐振子的因式分解法的推广.第 5 章系统介绍中心力场中径向 Schrödinger 方程的因式分解的新进展.分析表明,只当中心力场为各向同性谐振子势和 Coulomb 势时,径向 Schrödinger 方程才能进行因式分解,并导出能量和角动量的升、降算符.这两种中心势都具有除了几何对称性(空间旋转)之外的动力学对称性,这就导致能级进一步简并,因而可以引进四类升、降算符.值得注意,在经典力学中有一条著名的定理——Bertrand 定理:只当中心力遵守平方反比律或 Hooke 定律时,粒子束缚运动轨道才是闭合的.分析表明,径向 Schrödinger 方程的因式分解与经典粒子轨道的闭合性有密切的关系.

第 6 章介绍相干态,它是一种特殊的非定态.当初 Schrödinger 引进谐振子相干态,原本是为了探讨量子力学与经典力学的关系.20 世纪 60 年代后,相干态在量子光学中得到广泛应用和发展.在这里,相干态作为光子数不确定的一种特殊的态,有极大方便之处.近年来在原子和分子的 Rydberg 态研究中也很关注相干态问题.

第 7 章介绍密度矩阵.这里涉及完备测量和不完备测量概念,即纯态和混合态问题.这有助于更深入理解量子态概念,也有助于澄清量子力学中长期争论的一些问题,例如 EPR 佯谬和 Bell 不等式.

全同粒子体系的波函数的置换对称性,是不是量子力学的一

条基本原理？有人认为是，多数人认为它只是微观粒子的一种内禀对称性(全同性)所得出的一个推论，但论证并不很令人满意．第8章将分析这个问题，并着重指出全同性是一种可观测量，并与态的量子化密切相关．

通常量子力学教材中，散射问题和束缚态能量本征值问题往往分开讨论．实则两者密切相关．束缚能级的位置总是散射振幅在正虚 k 轴上的极点所在．第9章以许多常见的一维势阱为例，分析其透射振幅的极点，并与束缚定态能级的计算比较．这是初学者极有益的练习，有助于深入理解束缚定态．

* * *

相对论和量子力学是20世纪物理学两个最伟大的成就．就对人类近代物质文明的影响来讲，后者甚至超过前者．几乎没有哪一门近代物理学分支和与近代物理相关的边缘学科能离开量子力学这个理论基础．可以毫不夸张地说，没有量子力学的建立，就没有人类的近代物质文明．量子论的提出，快一百年了．量子力学体系的建立已历70余载．应该说它是一门比较成熟的学科．但也应该认识到，它还是一门在发展中的学科．即使在现今的理论框架下，也还有许多问题有待探明．何况量子力学在各前沿领域中的应用还正方兴未艾，有待开发的东西还层出不穷．本书所讨论的一些问题，只不过是其中很少的一部分．如果本书能引发青年学生、教师和科研工作者多去思考一下所碰到的量子力学问题，也许对发展这门学科有所裨益．物质世界是不可穷尽的．人们对它的认识也是没有止境的．

曾谨言

1996年8月于北京大学

责任编辑　李　昱
封面设计　张　楠
责任绘图　吴文信
版式设计　周顺银
责任校对　冯树秀　姜国平
责任印制　杨　明

目　　录

序言 ………………………………………………………………………… 1
1　量子力学中的相位 ……………………………………………………… 1
1.1　含时不变量与 Lewis 相 ……………………………………………… 2
1.2　Berry 绝热相 ………………………………………………………… 7
1.3　Aharonov-Anandan(AA)相 ………………………………………… 17
1.4　Berry 相，AA 相与 Lewis 相的关系 ………………………………… 24
1.5　二态体系的非绝热相 ………………………………………………… 28
1.6　Berry 相与 Aharonov-Bohm(AB)相的关系 ………………………… 37
1.7　量子力学中的相位不定性 …………………………………………… 40

2　带电粒子在磁场中的运动 ……………………………………………… 44
2.1　Landau 能级 ………………………………………………………… 46
2.2　各向同性带电谐振子在均匀磁场中的能谱壳结构 ………………… 59
2.3　互相垂直的均匀常磁场和电场中粒子的运动，Landau 能带 ……… 63
2.4　圆环上带电粒子的能谱与磁通 ……………………………………… 65
2.5　超导环内磁通量子化与 Meissner 效应 …………………………… 73
2.6　Aharonov-Bohm 效应 ……………………………………………… 76
2.7　标量 AB 效应 ……………………………………………………… 78
附录 1　规范不变性 ……………………………………………………… 83
A1.1　经典电动力学中的规范不变性 …………………………………… 83
A1.2　量子力学中的规范不变性 ………………………………………… 87
附录 2　量子化程序中的问题 …………………………………………… 93
A2.1　球坐标系中粒子动量和动能的算符表示 ………………………… 93
A2.2　二维粒子在平面极坐标系中动量和动能的算符表示 …………… 97
A2.3　Pauli 程序 ………………………………………………………… 101

3 重力相移 …… 104
3.1 COW 实验与重力相移 …… 104
3.2 弱等价原理 …… 106
3.3 强等价原理 …… 108
附录 Schrödinger 方程的 Galileo 不变性 …… 111

4 超对称量子力学方法简介 …… 114
4.1 Schrödinger 的因式分解法 …… 114
4.2 超对称量子力学方法 …… 117
4.3 形状不变性 …… 126
附录 1 超对称谐振子及其推广 …… 129
A1.1 超对称谐振子 …… 129
A1.2 有相互作用的超对称 Hamilton 量 …… 135
附录 2 $V(x)=-V_0\,\mathrm{sech}^2\,\beta x$ 势阱中粒子的束缚态 …… 138
附录 3 $V(x)=V_0\cot^2(\pi\eta x)$ 势阱中粒子的束缚态 …… 141

5 氢原子和各向同性谐振子的升、降算符 …… 144
5.1 三维各向同性谐振子 …… 145
5.2 二维各向同性谐振子 …… 152
5.3 径向 Schrödinger 方程的因式分解 …… 157
5.4 三维氢原子 …… 161
5.5 二维氢原子 …… 166

6 谐振子的相干态 …… 170
6.1 Schrödinger 相干态 …… 171
6.2 湮没算符的本征态,相干态表象 …… 178
6.3 压缩态 …… 182
附录 一些有用的代数式 …… 185

7 密度矩阵 …… 190
7.1 投影算符与密度算符 …… 190

7.2 混合态相应的密度算符 …… 196
7.3 约化密度矩阵,EPR 佯谬,Bell 不等式 …… 206

8 粒子全同性与波函数的置换对称性 …… 219
8.1 全同性概念 …… 219
8.2 全同粒子系波函数的置换对称性是否量子力学的一条基本原理 …… 221
8.3 全同性的进一步讨论 …… 224

9 一维势阱的束缚能级与透射振幅的极点 …… 228
9.1 δ势 …… 228
9.2 方势阱 …… 231
9.3 δ势阱+半壁无限高势垒 …… 234
9.4 半壁无限高方势阱 …… 237
9.5 双δ势阱 …… 240
9.6 不对称方势阱 …… 242
9.7 势阱 $V(x)=-V_0\operatorname{sech}^2\eta x$ …… 246
9.8 一维氢原子 …… 251

1 量子力学中的相位

杨振宁先生在纪念 Schrödinger 诞辰 100 周年的文章[1]中，一开头就引用了 Dirac 的一段重要的话：[2]

"问题在于，不对易性是否真是量子力学新概念的主体？我过去一直认为答案是肯定的．但最近我开始怀疑这一点．我想，从物理观点来说，不对易性可能并非唯一重要的观念，或许还存在某些更深层的观念，而且量子力学带来的一些通常的概念，或许还需要作某些更深刻的改变．"Dirac 进一步讨论了这个问题，并得出结

---

〔1〕 Yang C N. *Square root of minus one, Complex phases and Erwin Schrödinger*. In: Kilmister C W ed., Schrödinger Centenary Celebration of a Polymath. New York. Cambridge Univ. Press, 1987. 53～84. 中译文：唐贤民译，宁平治校．自然杂志，11(1)．这里给出的译文即根据此译文，但有个别修辞上的小改动．

〔2〕 Dirac P A M. Fields & Quanta, 1972(3): 139. 有关原文，如下：

"The question arises whether the noncommutation is really the main new idea of quantum mechanics. Previously I always thought it was but recently I have begun to doubt it and to think that maybe from the physical point of view, the noncommutation is not the only important idea and there is perhaps some deeper idea, some deeper change in our ordinary concepts which is brought about by quantum mechanics."

"So if one asks what is the main feature of quantum mechanics, I feel inclined now to say that it is not noncommutative algebra. It is the existence of probability amplitudes which underlie all atomic processes. Now a probability amplitude is related to experiment but only partially. The square of its modulus is something that we can observe. That is the probability which the experimental people get. But besides that there is a phase, a number of modulus unity which can modify without affecting the square of the modulus. And this phase is all important because it is the source of all interference phenomena but its physical significance is obscure. So the real genius of Heisenberg and Schrödinger, you might say, was to discover the existence of probability amplitudes containing this phase quantity which is very well hidden in nature and it is because it was so well hidden that people hadn't thought of quantum mechanics much earlier."

论:"所以,如果有人问,量子力学的主要特征是什么?现在我倾向于说,量子力学的主要特征并不是不对易代数,而是概率幅的存在.后者是全部原子过程的基础.概率幅是与实验相联系的,但这只是问题的一部分.概率幅的模方是我们能观测的某种量,即实验者所测量到的概率,但除此以外还有相位,它是模为1的数,它的变化不影响模方.但这个相位是极其重要的,因为它是所有干涉现象的根源,而其物理含义是极其隐晦难解的.所以可以说,Heisenberg与Schrödinger的真正天才在于他们发现了包含相位这个物理量的概率幅的存在.相位这个物理量很巧妙地隐藏在大自然中,正是由于它隐藏得如此巧妙,人们才未能更早建立起量子力学".

杨振宁先生还提到,人们对于Dirac的见解也许有不同的看法,即究竟是引入不对易代数重要,还是引入包含相位的概率幅重要.但无论如何,对于物理学家描述自然来讲,两者都很重要则是毫无疑义的.

在通常量子力学教材中,对于引进算符和不对易代数来描述可观测量,都给予了足够的篇幅来详细阐述,而对于概率幅的相位,虽然也都提到,但从教学经验和效果来讲,初学者对于相位和态叠加原理的理解,总是不如对Schrödinger方程和算符运算那样具体,而且往往还有不同程度的误解.事实上,从20世纪50年代末以来,量子力学理论的一些重要进展,大多涉及相位问题.由此可见Dirac讲这一段话的深刻含义.很可能有些问题,人们对它们的理解还不十分清楚.下面就我们了解到的几个问题提出来和大家讨论,也许有助于更深入地理解这些问题.

1.1 含时不变量与Lewis相[3]

为了对比,先讨论Hamilton量不含时情况($\partial \hat{H}/\partial t=0$).此时,

[3] Lewis H R, Riesenfeld W B. J. Math. Phys., 1969, 10: 1458.

$\hat{H}$ 本身就是守恒量(能量).能量本征值不随时间变化($dE/dt = 0$).体系存在严格的定态.考虑体系的某力学量 $\hat{F} = \hat{F}^{\dagger}$,它随时间的变化遵守下列方程

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{F},\hat{H}] + \frac{\partial}{\partial t}\hat{F}. \tag{1}$$

如

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{F},\hat{H}] + \frac{\partial}{\partial t}\hat{F} = 0, \tag{2}$$

则称 $\hat{F}$ 为体系的守恒量.通常人们感兴趣的守恒量是不含时的,即$\partial\hat{F}/\partial t = 0$.此时,只要

$$[\hat{F},\hat{H}] = 0, \tag{3}$$

则 $\hat{F}$ 为守恒量.这种不含时守恒量的特点是它与 $\hat{H}$ 对易,因而可以求它与 $\hat{H}$ 的共同本征态.

设$(\hat{H},\hat{F},\cdots)$构成体系的守恒量完全集,共同本征态记为$|n\nu\rangle$,ν 标记简并态,

$$\hat{H}|n\nu\rangle = E_n|n\nu\rangle. \tag{4}$$

体系状态随时间的演化$|\psi(t)\rangle$遵守 Schrödinger 方程,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle. \tag{5}$$

设体系初态为

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n\nu} C_{n\nu}|n\nu\rangle, C_{n\nu} = \langle n\nu|\psi(0)\rangle, \tag{6}$$

则方程(5)的一般解可表示为

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \sum_{n\nu} C_{n\nu}e^{-iE_nt/\hbar}|n\nu\rangle \\ &= \sum_{n\nu} C_{n\nu}|n\nu,t\rangle,\end{aligned} \tag{7}$$

式中

$$|n\nu,t\rangle = e^{-iE_nt/\hbar}|n\nu\rangle \tag{8}$$

是体系的一个定态波函数.注意,(7)式中 $C_{n\nu}$不依赖于 t,由初态决定(见(6)式).

在 $\hat{H}$ 不含时情况($\partial\hat{H}/\partial t=0$),对于含时不变量($\mathrm{d}\hat{F}/\mathrm{d}t=0$,但 $\partial\hat{F}/\partial t\neq0$),有$[\hat{F},\hat{H}]\neq0$.能量本征态不可能为 $\hat{F}$ 的本征态,反之亦然.所以含时守恒量及其本征态并无多大意义.

以下讨论 $\hat{H}(t)$含时的体系($\partial\hat{H}/\partial t\neq0$).凡满足

$$\frac{\mathrm{d}\hat{I}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{I},\hat{H}]+\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}=0,\hat{I}^{\dagger}=\hat{I},\tag{9}$$

的力学量 $\hat{I}(t)$($\partial\hat{I}/\partial t\neq0$),称为含时不变量.显然,$[\hat{I}(t),\hat{H}(t)]\neq0$.它们不能有共同本征函数集.但不妨假定体系存在包含 $\hat{I}(t)$ 在内的一组守恒量完全集(其中没有 $\hat{H}(t)$),其共同本征态记为 $|\lambda\kappa,t\rangle$,

$$\hat{I}(t)|\lambda\kappa,t\rangle=\lambda|\lambda\kappa,t\rangle,\tag{10}$$

κ 标记简并态.$|\lambda\kappa,t\rangle$满足正交归一化条件

$$\langle\lambda'\kappa',t|\lambda\kappa,t\rangle=\delta_{\lambda'\lambda}\delta_{\kappa'\kappa}.\tag{11}$$

容易证明:

(a) 本征值 λ 不随时间变化,$\mathrm{d}\lambda/\mathrm{d}t=0$.

(b) 一般说来,$|\lambda\kappa,t\rangle$不满足含时 Schrödinger 方程.但$|\lambda\kappa,t\rangle$具有一个含时相位不定性.可以经过一个含时相位变换后,使之满足含时 Schrödinger 方程.

证明如下:

(a) (10)式对 t 微商,得

$$\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle+\hat{I}\frac{\partial}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle=\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}|\lambda\kappa,t\rangle+\lambda\frac{\partial}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle.\tag{12}$$

左乘$\langle\lambda\kappa,t|$,利用(10)式并注意 $\hat{I}^{\dagger}=\hat{I}$,$\lambda$ 为实数,得

$$\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}=\langle\lambda\kappa,t|\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle.\tag{13}$$

其次,利用守恒量条件(9)式对$|\lambda\kappa,t\rangle$运算,得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle+\hat{I}\hat{H}|\lambda\kappa,t\rangle-\lambda\hat{H}|\lambda\kappa,t\rangle=0.\tag{14}$$

左乘$\langle\lambda'\kappa',t|$,得

$$\mathrm{i}\hbar\langle\lambda'\kappa',t|\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle+(\lambda'-\lambda)\langle\lambda'\kappa',t|\hat{H}|\lambda\kappa,t\rangle=0. \tag{15}$$

对于 $\lambda'=\lambda(\kappa'=\kappa$ 或$\kappa'\neq\kappa$,均可),得

$$\langle\lambda\kappa',t|\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle=0. \tag{16}$$

代入(13)式,得 $\mathrm{d}\lambda/\mathrm{d}t=0$.

(b) 考虑到 $\mathrm{d}\lambda/\mathrm{d}t=0$,(12)式化为

$$(\lambda-\hat{I})\frac{\partial}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle=\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle.$$

左乘$\langle\lambda'\kappa',t|$,利用(15)式,得

$$\mathrm{i}\hbar(\lambda-\lambda')\langle\lambda'\kappa',t|\frac{\partial}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle=(\lambda-\lambda')\langle\lambda'\kappa',t|\hat{H}|\lambda\kappa,t\rangle. \tag{17}$$

因此,当 $\lambda'\neq\lambda$ 时($\kappa'=\kappa$ 或$\kappa'\neq\kappa$,均可),得

$$\mathrm{i}\hbar\langle\lambda'\kappa',t|\frac{\partial}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle=\langle\lambda'\kappa',t|\hat{H}|\lambda\kappa,t\rangle. \tag{18}$$

但注意,$\lambda'=\lambda$ 时,上式不一定成立,否则,根据$|\lambda\kappa,t\rangle$的完备性,就意味着$|\lambda\kappa,t\rangle$满足 Schrödinger 方程. 所以,一般说来,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle=\hat{H}|\lambda\kappa,t\rangle$$

并不成立. 因此,即使利用$|\lambda\kappa,t\rangle$的完备性来展开体系任何一个态$|\psi(t)\rangle$,

$$|\psi(t)\rangle=\sum_{\lambda\kappa}a_{\lambda\kappa}(t)|\lambda\kappa,t\rangle, \tag{19}$$

展开系数 $a_{\lambda\kappa}(t)$必然依赖于 t,这与(7)式不同,因而对求解$|\psi(t)\rangle$并无优越性.

但$|\lambda\kappa,t\rangle$作为$\hat{I}(t)$的本征态,还有含时相位不定性. 假设$\hat{I}(t)$不含有对 t 微商的算符,则$|\lambda\kappa,t\rangle$可以乘上一个含时相因子,即作如下含时相位变换,

$$|\lambda\kappa,t\rangle\rightarrow|\widetilde{\lambda\kappa},t\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\kappa}(t)}|\lambda\kappa,t\rangle, \tag{20}$$

$|\widetilde{\lambda\kappa},t\rangle$与$|\lambda\kappa,t\rangle$一样，仍为$\hat{I}(t)$的本征态(本征值不变)，正交归一性也保持不变. 但此时，我们可以要求$|\widetilde{\lambda\kappa},t\rangle$满足 Schrödinger 方程，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\widetilde{\lambda\kappa},t\rangle=\hat{H}(t)|\widetilde{\lambda\kappa},t\rangle. \tag{21}$$

用(20)式代入，得

$$-\hbar\dot{\alpha}_{\lambda\kappa}|\lambda\kappa,t\rangle+\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle=\hat{H}(t)|\lambda\kappa,t\rangle,$$

左乘$\langle\lambda\kappa',t|$，得

$$\hbar\dot{\alpha}_{\lambda\kappa}\delta_{\kappa\kappa'}=\langle\lambda\kappa',t|\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}|\lambda\kappa,t\rangle. \tag{22}$$

为满足此式，要求$\kappa'\neq\kappa$时上式右边为0，即要求在λ给定的子空间中，可以把$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}\right)$对角化，而这是可以做到的，因为$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}\right)$为厄米算符. 也就是说，总可以找到$\alpha_{\lambda\kappa}(t)$，使之满足

$$\hbar\dot{\alpha}_{\lambda\kappa}=\langle\lambda\kappa,t|\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}(t)|\lambda\kappa,t\rangle. \tag{23}$$

对t积分，得

$$\alpha_{\lambda\kappa}(t)-\alpha_{\lambda\kappa}(0)=\int_0^t\mathrm{d}t'\langle\lambda\kappa,t'|\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t'}-\frac{\hat{H}(t')}{\hbar}|\lambda\kappa,t'\rangle. \tag{24}$$

$\alpha_{\lambda\kappa}(t)$称为 Lewis 相.

考虑到$|\widetilde{\lambda\kappa},t\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\kappa}(t)}|\lambda\kappa,t\rangle$满足 Schrödinger 方程，并且是完备的，所以满足 Schrödinger 方程的任何态$|\psi(t)\rangle$总可以用它们来展开，展开系数不再依赖于时间，

$$|\psi(t)\rangle=\sum_{\lambda\kappa}C_{\lambda\kappa}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\kappa}(t)}|\lambda\kappa,t\rangle, \tag{25}$$

$$C_{\lambda\kappa}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_{\lambda\kappa}(0)}\langle\lambda\kappa,0|\psi(0)\rangle,$$

式中$\alpha_{\lambda\kappa}(t)$由(24)式给出.

例如，设$|\psi(0)\rangle = |\lambda_0\kappa_0, 0\rangle$，则 $C_{\lambda\kappa} = \delta_{\lambda\lambda_0}\delta_{\kappa\kappa_0}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_{\lambda_0\kappa_0}(\theta)}$，而

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}[\alpha_{\lambda_0\kappa_0}(t) - \alpha_{\lambda_0\kappa_0}(0)]}|\lambda_0\kappa_0, t\rangle, \tag{26}$$

$$\alpha_{\lambda_0\kappa_0}(t) - \alpha_{\lambda_0\kappa_0}(0) = \int_0^t \mathrm{d}t' \langle\lambda_0\kappa_0, t'|\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t'} - \frac{\hat{H}(t')}{\hbar}|\lambda_0\kappa_0, t'\rangle,$$

即在 t 时刻，体系仍然处于含时守恒量的本征态(与初始时刻相同)，这是守恒量的特点. 如初始态为

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{\lambda\kappa} C_{\lambda\kappa}|\lambda\kappa, 0\rangle, \tag{27}$$

则

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\lambda\kappa} C_{\lambda\kappa}\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\alpha_{\lambda\kappa}(t) - \alpha_{\lambda\kappa}(0)]}|\lambda\kappa, t\rangle. \tag{28}$$

1.2 Berry 绝热相[4]

为对比，先考虑 Hamilton 量 $\hat{H}$ 不含时的体系. 能量为守恒量. 包含 $\hat{H}$ 在内的一组守恒量完全集的共同本征态记为$|\psi_m\rangle$，

$$\hat{H}|\psi_m\rangle = E_m|\psi_m\rangle, (E_m \text{ 为实数}) \tag{1}$$

$$\langle\psi_m|\psi_{m'}\rangle = \delta_{mm'}.$$

设体系初态为

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_n\rangle, \tag{2}$$

容易证明，

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}|\psi_n\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}|\psi(0)\rangle. \tag{3}$$

严格满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle. \tag{4}$$

---

[4] Berry M V. Proc. Roy. Soc., 1984, A392:45.

(3)式称为定态波函数. $|\psi(t)\rangle$ 与初态 $|\psi(0)\rangle$ 只差一个相因子 $e^{-iE_n t/\hbar}$, $-E_n t/\hbar$ 常称为"动力学相"(dynamical phase). 方程(4)的一般解可以表示成

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m C_m e^{-iE_m t/\hbar}|\psi_m\rangle, \tag{5}$$

式中展开系数 C_m 不依赖于时间 t,由初态 $|\psi(0)\rangle$ 决定

$$C_m = \langle\psi_m|\psi(0)\rangle. \tag{6}$$

现在考虑 Hamilton 量 $\hat{H}(t)$ 含时的体系. 此时能量不是守恒量,体系不存在严格的定态. 通常 $\hat{H}(t)$ 是通过参量 $\boldsymbol{R}(t)$ 而随时间演化,例如 $\boldsymbol{R}(t)$ 代表外磁场 $\boldsymbol{B}(t)$ 或外电场 $\boldsymbol{E}(t)$. $\boldsymbol{R}(t)$ 张开一个参数空间. $\hat{H}(R(t))$ 随参数 $\boldsymbol{R}(t)$(因而随 t)而变化. 但我们不妨考虑 $\hat{H}(\boldsymbol{R}(t))$ 的瞬时本征态(instantaneous eigenstate),

$$\hat{H}(\boldsymbol{R}(t))|\psi_m(\boldsymbol{R}(t))\rangle = E_m(\boldsymbol{R}(t))|\psi_m(\boldsymbol{R}(t))\rangle, \tag{7}$$

$$\langle\psi_m(\boldsymbol{R}(t))|\psi_{m'}(\boldsymbol{R}(t))\rangle = \delta_{mm'}.$$

设体系初态为 H 的某瞬时本征态,

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_n(\boldsymbol{R}(0))\rangle. \tag{8}$$

乍一看来,似乎 $|\psi(t)\rangle$ 可以表示成

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(\boldsymbol{R}(t'))dt'\right]|\psi_n(\boldsymbol{R}(t))\rangle, \tag{9}$$

但这是完全错误的[5],因为它不满足 Schrödinger 方程,

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle &= \hat{H}|\psi(t)\rangle + \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(\boldsymbol{R}(t'))\right] \\ &\quad \times i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_n(\boldsymbol{R}(t))\rangle \\ &\neq \hat{H}|\psi(t)\rangle, \end{aligned} \tag{10}$$

原因是在(9)式中只有本征值 $E_n(\boldsymbol{R}(t))$ 随时间的变化被考虑了,而未计及本征态 $\psi_n(\boldsymbol{R}(t))$ 随时间的演化是否满足 Schrödinger 动力学方程.

---

[5] Zeng J Y, Lei Y A. Phys. Rev., 1995, A51: 4415.

事实上，$\hat{H}$ 含时情况下，Schrödinger 方程的一般解仍可表示成

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m C_m(t)\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t' E_m(\boldsymbol{R}(t'))\right]|\psi_m(\boldsymbol{R}(t))\rangle, \tag{11}$$

但式中展开系数 $C_m(t)$依赖于 t，

$$C_m(t) = \langle\psi_m(\boldsymbol{R}(t))|\psi(t)\rangle\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t' E_m(\boldsymbol{R}(t'))\right] \tag{12}$$

其初值为

$$C_m(0) = \langle\psi_m(\boldsymbol{R}(0))|\psi(0)\rangle. \tag{13}$$

设$|\psi(0)\rangle = |\psi_n(\boldsymbol{R}(0))\rangle$，即 $C_m(0) = \delta_{mn}$. 但这并不能保证 $C_m(t) \propto \delta_{mn}$. 所谓绝热近似[6]，即假设 $\boldsymbol{R}(t)$变化极为缓慢，使

$$C_m(t) \propto \delta_{mn} \tag{14}$$

即$|\psi(t)\rangle$(与$|\psi(0)\rangle$一样)仍处于 $\hat{H}(\boldsymbol{R}(t))$的本征态$\psi_n(\boldsymbol{R}(t))$. 但应注意，即使在绝热近似下，

$$C_m(t) \neq \delta_{mn} \tag{15}$$

因为这样给出的解(见(9)式)根本不满足 Schrödinger 方程(见(10)式). 正确的绝热近似解(保证概率守恒)应为

$$|\psi(t)\rangle = a_n(t)\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t' E_n(\boldsymbol{R}(t'))\right]|\psi_n(\boldsymbol{R}(t))\rangle \tag{16}$$

$$|a_n(t)|^2 = 1.$$

因此可令

$$a_n(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta_n(t)}, (\beta_n(t) \text{ 实}). \tag{17}$$

用(16)，(17)式代入含时 Schrödinger 方程(4)，对 t 积分后可得出

$$\beta_n(t) = \mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t' \langle\psi_n(\boldsymbol{R}(t'))|\frac{\partial}{\partial t'}|\psi_n(\boldsymbol{R}(t'))\rangle. \tag{18}$$

---

[6] 例如，参阅：Messiah A. *Quantum Mechanics* Vol. II. Amsterdam: North-Holland, 1961. 739～742, 744～758; Schiff L. I. *Quantum Mechanics*. 3rd. ed. New York: McGraw-Hill, 1968. 289～291, 440.

此即 Berry 绝热相(adiabatic phase)、绝热近似解(16)中的相因子 $e^{i\alpha_n(t)}$ 中的

$$\alpha_n(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(\boldsymbol{R}(t')), \tag{19}$$

习惯上称为动力学相(dynamical phase). 但从上述推导可以看出, Berry 绝热相的出现是由于要求量子态随时间的演化必须满足 Schrödinger 动力学方程. 因此, 从根本上来讲, 无论 $\alpha_n(t)$ 或 $\beta_n(t)$, 其根源都是动力学的要求.

当然, 正如 Berry 所作的那样, (18)式可以化为参数空间中的积分

$$\beta_n(t) = i\int_{\boldsymbol{R}(0)}^{\boldsymbol{R}(t)} d\boldsymbol{R}\cdot\langle\psi_n(\boldsymbol{R})|\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle. \tag{20}$$

设 $H(\boldsymbol{R}(t))$ 作周期性变化, $\boldsymbol{R}(\tau)=\boldsymbol{R}(0)$,

$$H(\boldsymbol{R}(\tau)) = H(\boldsymbol{R}(0)), \tag{21}$$

则(20)式中在参数空间中的积分是沿一条闭曲线 C 的积分. 此时, Berry 相可记为 $\beta(C)$,

$$\beta(C) = \oint_C \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R})\cdot d\boldsymbol{R}, \tag{22}$$

$$\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R}) = i\langle\psi_n(\boldsymbol{R})|\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle. \tag{23}$$

不难证明, $\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R})$ 为实数[注]. 所以 $\beta_n(C)$ 也为实数.

利用 Stokes 定理, (20)式可化为参数空间中的面积分(见图 1.1)

[注] 利用 $\langle\psi_n(\boldsymbol{R})|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle = 1$, 有

$$\langle\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}\psi_n(\boldsymbol{R})|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle + \langle\psi_n(\boldsymbol{R})|\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle = 0$$

所以 $\langle\psi_n(\boldsymbol{R})|\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle = -\langle\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}\psi_n(\boldsymbol{R})|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle = -\langle\psi_n(\boldsymbol{R})|\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle^*$ 为纯虚数. 所以 $\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R})$ 为实数.

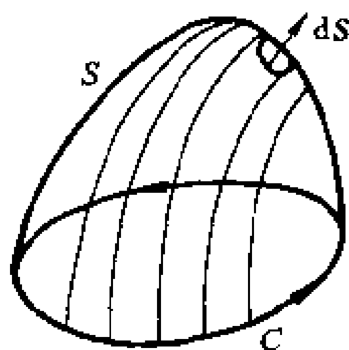


图 1.1

$$\beta_n(C) = \iint_S \left[\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} \times \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R})\right] \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} = \iint_S \boldsymbol{B}_n \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{24}$$

形式上，$\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R})$可看作参数空间中的“矢势”，$\boldsymbol{B}_n = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} \times \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R})$可看成相应的“磁场强度”，而 $\beta_n(C)$代表通过以闭曲线 C 为边界的曲面 S 的“磁通量”. 可以看出，$\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R})$与规范有关，而 $\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{R})$和 $\beta_n(C)$则与规范无关.

可以证明，除了“磁单极”奇点(由于能级简并引起)外，

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{R}) = 0, \left(\nabla \equiv \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}}\right). \tag{25}$$

证明：

$$\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{R}) = \nabla \times \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R}) = -\operatorname{Im} \nabla \times \langle \psi_n(\boldsymbol{R}) | \nabla \psi_n(\boldsymbol{R})\rangle,$$

利用$\nabla \times (u\boldsymbol{a}) = (\nabla u) \times \boldsymbol{a} + u \nabla \times \boldsymbol{a}$，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{R}) &= -\operatorname{Im}\langle \nabla \psi_n(\boldsymbol{R}) | \times \nabla \psi_n(\boldsymbol{R})\rangle \\ &= -\operatorname{Im}\sum_{m \neq n} \langle \nabla \psi_n(\boldsymbol{R}) | \psi_m(\boldsymbol{R})\rangle \times \langle \psi_m(\boldsymbol{R}) | \nabla \psi_n(\boldsymbol{R})\rangle,\end{aligned}$$

(因为$\langle\psi_n(\boldsymbol{R})|\nabla\ \psi_n(\boldsymbol{R})\rangle$为纯虚数.)利用[注]

$$\langle\psi_m(\boldsymbol{R})|\nabla\ \psi_n(\boldsymbol{R})\rangle=\frac{\langle\psi_m(\boldsymbol{R})|(\nabla\ \hat{H}(\boldsymbol{R}))|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle}{E_n(\boldsymbol{R})-E_m(\boldsymbol{R})},\tag{26}$$

得

$$\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{R})=-\operatorname{Im}\sum_{m\neq n}\frac{\langle\psi_n(\boldsymbol{R})|(\nabla\ \hat{H})|\psi_m(\boldsymbol{R})\rangle\times\langle\psi_m(\boldsymbol{R})|(\nabla\ \hat{H})|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle}{(E_n(\boldsymbol{R})-E_m(\boldsymbol{R}))^2}.\tag{27}$$

定义厄米算符

$$\boldsymbol{F}=-\mathrm{i}\sum_n|\nabla\ \psi_n(\boldsymbol{R})\rangle\langle\psi_n(\boldsymbol{R})|=\boldsymbol{F}^{\dagger},\tag{28}$$

则

$$|\nabla\ \psi_n\rangle=\mathrm{i}\boldsymbol{F}|\psi_n\rangle,\tag{29}$$

$$\begin{aligned}\langle\psi_m|\boldsymbol{F}|\psi_n\rangle&=-\mathrm{i}\sum_{n'}\langle\psi_m|\nabla\ \psi_{n'}\rangle\langle\psi_{n'}|\psi_n\rangle\\&=-\mathrm{i}\langle\psi_m|\nabla\ \psi_n\rangle=-\mathrm{i}\frac{\langle\psi_m|(\nabla\ \hat{H})|\psi_n\rangle}{E_n-E_m},\end{aligned}$$

即

$$\frac{\langle\psi_m|(\nabla\ \hat{H})|\psi_n\rangle}{E_n-E_m}=\mathrm{i}\langle\psi_m|\boldsymbol{F}|\psi_n\rangle.\tag{30}$$

所以

$$\begin{aligned}\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{R})&=-\operatorname{Im}\sum_{m\neq n}\langle\psi_n|\boldsymbol{F}|\psi_m\rangle\times\langle\psi_m|\boldsymbol{F}|\psi_n\rangle\\&=-\operatorname{Im}\langle\psi_n|\boldsymbol{F}\times\boldsymbol{F}|\psi_n\rangle,\end{aligned}\tag{31}$$

[注] 对$\hat{H}(\boldsymbol{R})|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle=E_n(\boldsymbol{R})|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle$取梯度,得

$(\nabla\ \hat{H})|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle+\hat{H}\nabla|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle=(\nabla\ E_n(\boldsymbol{R}))|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle+E_n(\boldsymbol{R})\nabla|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle$,左乘$\langle\psi_m(\boldsymbol{R})|$,可得$\langle\psi_m(\boldsymbol{R})|(\nabla\ \hat{H})|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle+E_m\langle\psi_m(\boldsymbol{R})|\nabla|\psi_n(\boldsymbol{R})\rangle=(\nabla\ E_n(\boldsymbol{R}))\delta_{mn}+E_n\langle\psi_m(\boldsymbol{R})|\nabla\ \psi_n(\boldsymbol{R})\rangle$.
对于$m\neq n$,即可得出(26)式.

而

$$
\begin{aligned}
\nabla\cdot\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{R}) &= -\operatorname{Im}\{\langle\nabla\psi_n|\cdot(\boldsymbol{F}\times\boldsymbol{F})|\psi_n\rangle \\
&\quad+\langle\psi_n|(\boldsymbol{F}\times\boldsymbol{F})\cdot|\nabla\psi_n\rangle \\
&\quad+\langle\psi_n|\nabla\cdot(\boldsymbol{F}\times\boldsymbol{F})|\psi_n\rangle\} \\
&= -\operatorname{Im}\{-\mathrm{i}\langle\psi_n|\boldsymbol{F}\cdot(\boldsymbol{F}\times\boldsymbol{F})|\psi_n\rangle \\
&\quad+\mathrm{i}\langle\psi_n|(\boldsymbol{F}\times\boldsymbol{F})\cdot\boldsymbol{F}|\psi_n\rangle \\
&\quad+\langle\psi_n|(\nabla\times\boldsymbol{F})\cdot\boldsymbol{F}-\boldsymbol{F}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{F})|\psi_n\rangle\}.
\end{aligned}
$$

利用

$$
\begin{aligned}
\nabla\times\boldsymbol{F} &= -\mathrm{i}\sum_n|\nabla\psi_n\rangle\times\langle\nabla\psi_n| = -\mathrm{i}\sum_n\boldsymbol{F}|\psi_n\rangle\times\langle\psi_n|\boldsymbol{F} \\
&= -\mathrm{i}\boldsymbol{F}\times\boldsymbol{F}
\end{aligned} \tag{32}
$$

所以$\nabla\cdot\boldsymbol{B}_n(\boldsymbol{R})=0$(简并奇点 $E_m(\boldsymbol{R})=E_n(\boldsymbol{R})$除外).

例　磁共振

考虑自旋 $s=\hbar/2$ 的粒子,有磁矩 $\boldsymbol{\mu}$,在转动磁场 $\boldsymbol{B}(t)$中运动,$\boldsymbol{B}(t)=(B_1\cos 2\omega_0 t, B_1\sin 2\omega_0 t, B_0)$,$\omega_0=\mu B_0/\hbar$(图 1.2).

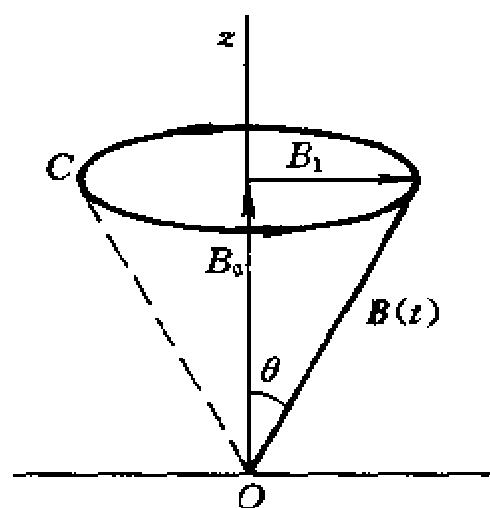


图 1.2

Hamilton 量(采用 Pauli 表象)

$$
\hat{H}(t) = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B},\quad(\boldsymbol{\mu}=\mu\boldsymbol{\sigma})
$$

$$= \begin{pmatrix} -\mu B_0 & -\mu B_1 e^{-2i\omega_0 t} \\ -\mu B_1 e^{+2i\omega_0 t} & \mu B_0 \end{pmatrix}, \tag{33}$$

$$\hat{H}(\tau) = \hat{H}(0), \quad \tau = \pi/\omega_0. \tag{34}$$

容易求出 $\hat{H}(t)$的瞬时本征值和本征态为

$$E_{\pm} = \pm \mu \sqrt{B_1^2 + B_0^2}, \tag{35}$$

$$\psi_-(t) = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2} e^{-2i\omega_0 t} \end{pmatrix},$$

$$\psi_+(t) = \begin{pmatrix} -\sin\dfrac{\theta}{2} \\ \cos\dfrac{\theta}{2} e^{-2i\omega_0 t} \end{pmatrix} \tag{36}$$

$$\tan\theta = B_1/B_0 = \omega_1/\omega_0, \quad \omega_1 = \mu B_1/\hbar. \tag{37}$$

显然 $\psi_{\pm}(\tau) = \psi_{\pm}(0)$.

设初态$|\psi(0)\rangle = |\psi_-(0)\rangle$,则绝热近似解可以表示为

$$|\psi(t)\rangle = a_-(t)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_-(t')\right]|\psi_-(t)\rangle,$$
$$|a_-(t)| = 1. \tag{38}$$

代入 Schrödinger 方程,对 t 积分后,可求出

$$a_-(t) = e^{2i\omega_0 t \sin^2\theta/2}, \tag{39}$$

即 Berry 绝热相为

$$\beta_-(t) = 2\omega_0 t \sin^2\theta/2. \tag{40}$$

经历一周期后,

$$\beta(\tau) = 2\omega_0\tau \sin^2\theta/2. \tag{41}$$

利用(34)式,$\omega_0\tau = \pi$,上式可改写成

$$\beta(C) = \pi(1 - \cos\theta) = \Omega(C)/2, \tag{42}$$

$\Omega(C) = 2\pi(1 - \cos\theta)$是磁场 $\boldsymbol{B}(t)$在参数空间中张开的立体角.

磁共振体系在放弃绝热近似下的一般解也可容易解出[7].令

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} \tag{43}$$

代入 Schrödinger 方程,(参阅(33)式),

$$\mathrm{i}\begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\omega_0 & +\omega_1 \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega_0 t} \\ -\omega_1 \mathrm{e}^{+2\mathrm{i}\omega_0 t} & \omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{44}$$

即

$$\begin{aligned} \dot{a} &= \mathrm{i}\omega_0 a - \mathrm{i}\omega_1 \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega_0 t} b, \\ \dot{b} &= \mathrm{i}\omega_1 \mathrm{e}^{+2\mathrm{i}\omega_0 t} a - \mathrm{i}\omega_0 b. \end{aligned} \tag{45}$$

令

$$a(t) = c_1(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}, b(t) = c_2(t)\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\omega_0 t} \tag{46}$$

代入(45)式,得

$$\dot{c}_1 = \mathrm{i}\omega_1 c_2, \quad \dot{c}_2 = \mathrm{i}\omega_1 c_1.$$

两式相加、减,得

$$\dot{c}_1 + \dot{c}_2 = \mathrm{i}\omega_1(c_1 + c_2), \quad \dot{c}_1 - \dot{c}_2 = -\mathrm{i}\omega_1(c_1 - c_2).$$

积分,得

$$\begin{aligned} c_1(t) + c_2(t) &= [c_1(0) + c_2(0)]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1 t}, \\ c_1(t) - c_2(t) &= [c_1(0) - c_2(0)]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t}. \end{aligned}$$

上两式分别相加、减,可得

$$\begin{aligned} c_1(t) &= \frac{1}{2}\{[c_1(0) + c_2(0)]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1 t} + [c_1(0) - c_2(0)]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t}\}, \\ c_2(t) &= \frac{1}{2}\{[c_1(0) + c_2(0)]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1 t} - [c_1(0) - c_2(0)]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t}\}. \end{aligned} \tag{47}$$

设初态为

---

[7] 例如,参阅:钱伯初,曾谨言.量子力学习题精选与剖析.北京:科学出版社,1988.282.Landau L D, Lifshitz E M. *Quantum Mechanics*. New York: Pergamon Press, 1977.469～470.

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix}, \tag{48}$$

按(46)式,可知 $c_1(0)=a_0, c_2(0)=b_0$,代入(47)式,可求出

$$\begin{aligned} c_1(t) &= a_0\cos\omega_1 t + \mathrm{i}b_0\sin\omega_1 t, \\ c_2(t) &= \mathrm{i}a_0\cdot\sin\omega_1 t + b_0\cos\omega_1 t. \end{aligned} \tag{49}$$

所以

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} \\ c_2(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (a_0\cos\omega_1 t + \mathrm{i}b_0\sin\omega_1 t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} \\ (\mathrm{i}a_0\sin\omega_1 t + b_0\cos\omega_1 t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{50}$$

此即在初条件(48)下,$|\psi(t)\rangle$的一般解.

特例,设

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_-(0)\rangle = \begin{pmatrix} \cos\theta/2 \\ \sin\theta/2 \end{pmatrix}, \tag{51}$$

则在非绝热情况下的一般解为

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \begin{pmatrix} \left(\cos\frac{\theta}{2}\cos\omega_1 t + \mathrm{i}\sin\frac{\theta}{2}\sin\omega_1 t\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} \\ \left(\mathrm{i}\cos\frac{\theta}{2}\sin\omega_1 t + \sin\frac{\theta}{2}\cos\omega_1 t\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} \end{pmatrix} \\ &= (\cos\omega_1 t + \mathrm{i}\sin\theta\cdot\sin\omega_1 t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}|\psi_-(t)\rangle \\ &\quad + \mathrm{i}\cos\theta\sin\omega_1 t\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}|\psi_+(t)\rangle \end{aligned} \tag{52}$$

所以在非绝热情况下,即使初态$|\psi(0)\rangle = |\psi_-(0)\rangle$,即为$\hat{H}(t)$的一个瞬时本征态,在 t 时刻,体系仍有一定概率处于其它瞬时本征态. 由(52)式可知,t 时刻体系处于$|\psi_\pm(t)\rangle$的概率分别为

$$\begin{aligned} P_+(t) &= \cos^2\theta\sin^2\omega_1 t, \\ P_-(t) &= \cos^2\omega_1 t + \sin^2\theta\sin^2\omega_1 t. \end{aligned} \tag{53}$$

在 $t = n\pi/\omega_1, n = 1,2,3,\cdots$时,$P_-(t)=0$,体系处于$|\psi_-(t)\rangle$. 但注意,此时

$$|\psi_-(t=n\pi/\omega_1)\rangle = \cos\theta/2\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \sin\theta/2\cdot e^{i2\pi n\omega_0/\omega}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \quad (54)$$

可以看出,只有当 $\omega_1/\omega_0 = B_1/B_0 = n, n = 1,2,3,\cdots$,而 $t = n\pi/\omega_1 = \pi/\omega_0 = \tau$ 时,

$$|\psi(\tau)\rangle = (-1)^{n+1}|\psi(0)\rangle, \quad (55)$$

$|\psi(\tau)\rangle$才能回到初态$|\psi(0)\rangle$,但有一个相位差 $\phi = (n+1)\pi$.(在一般情况下,$|\psi(\tau)\rangle$并不回到初态$|\psi(0)\rangle$.

按照 Aharonov-Anandan 推广了的 Berry 绝热相概念,对于一个周期演化的体系,"动力学相"定义为(§1.3,式(5)),$\alpha(\tau) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^\tau dt\bar{E}(t)$, $\bar{E}(t) = \langle\psi(t)|\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$. 利用(53)式,$\bar{E}(t) = P_+(t)E_+ + P_-(t)E_- = E|(P_+ - P_-) = |E|(\cos 2\theta\sin^2\omega_1 t - \cos^2\omega_1 t)$. 再利用 $\omega_1/\omega_0 = n = B_1/B_0 = \tan\theta$, $\tau = \pi/\omega_0 = n\pi/\omega_1$,可求出 $\alpha(\tau) = n\pi\sin\theta$,而 AA 相(推广了的 Berry 相)为 $\beta(\tau) = \phi - \alpha(\tau) = (n+1)\pi - \pi n\sin\theta$,或表成

$$\beta(\tau) = \pi[1 + n(1-\sin\theta)] = \pi\left[1 + n\left(1 - \frac{n}{\sqrt{1+n^2}}\right)\right], \quad (56)$$

而 Berry 绝热相 $\beta_{adi}(\tau) = \pi(1-\cos\theta) = \pi[1 - 1/\sqrt{n^2+1}]$. 可以看出,在绝热近似下($n = \omega_1/\omega_0 \gg 1$),AA 相(56)式将趋于 Berry 绝热相.

1.3 Aharonov-Anandan(AA)相[8]

Aharonov 和 Anandan 对 Berry 绝热相概念做了重要推广,即放弃绝热近似假定. 他们考虑一个体系的量子态 $|\psi(t)\rangle$,按照

---

[8] Aharonov Y, Anandan J. Phys. Rev. Lett., 1987, **58**: 1593.

Schrödinger 方程演化，假设经历一个周期 τ 后，

$$|\psi(\tau)\rangle = e^{i\phi}|\psi(0)\rangle, \tag{1}$$

即回到初态，但有一个相位差 ϕ. 试作含时相变换，

$$|\psi(t)\rangle = e^{if(t)}|\tilde{\psi}(t)\rangle, \tag{2}$$

并要求 $f(\tau)-f(0)=\phi$，即 $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ 在经历一周期后无相位变化，

$$|\tilde{\psi}(\tau)\rangle = |\tilde{\psi}(0)\rangle. \tag{3}$$

注意，$|\tilde{\psi}(t)\rangle$ 不再遵守 Schrödinger 方程. 用(2)式代入 Schrödinger 方程，

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle &= -\hbar\dot{f}|\psi(t)\rangle + e^{if(t)}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle \\ &= H(t)|\psi(t)\rangle, \end{aligned}$$

左乘 $\langle\psi(t)|$，得

$$-\hbar\dot{f} + \langle\tilde{\psi}(t)|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle = \langle\psi(t)|H(t)|\psi(t)\rangle.$$

对 t 积分，得

$$\begin{aligned} f(\tau)-f(0) &= \int_0^\tau dt\langle\psi(t)|\frac{-H(t)}{\hbar}|\psi(t)\rangle \\ &\quad + \int_0^\tau dt\langle\tilde{\psi}(t)|i\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle \\ &= \alpha(\tau)+\beta(\tau). \end{aligned} \tag{4}$$

其中

$$\alpha(\tau) = \int_0^\tau dt\langle\psi(t)|\frac{-H(t)}{\hbar}|\psi(t)\rangle, \tag{5}$$

$$\beta(\tau) = \int_0^\tau dt\langle\tilde{\psi}(t)|i\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle = \phi-\alpha(\tau) \tag{6}$$

他们把 $\alpha(\tau)$ 称为动力学相(dynamical phase)，把总相差 ϕ 与动力学相 $\alpha(\tau)$ 之差 $\phi-\alpha(\tau)=\beta(\tau)$ 称为几何相(geometric phase). 显然，在 $\hat{H}$ 不含时情况下，如 $|\psi(t)\rangle$ 为 $\hat{H}$ 本征态(本征值为 E)，则 $\alpha(\tau)=-E\tau/\hbar$，即平常所谓的动力学相. 在 $\hat{H}(\boldsymbol{R}(t))$ 作绝热近似变化情况下，如 $|\psi(t)\rangle$ 为 $\hat{H}(\boldsymbol{R}(t))$ 的瞬时本征态 $|\psi_n(\boldsymbol{R}(t))\rangle$，则 $\alpha(\tau)$ 为 $-\frac{1}{\hbar}\int_0^\tau dtE_n(\boldsymbol{R}(t))$，而 $\beta(\tau)$ 化为

$$\mathrm{i}\int_0^{\tau}\mathrm{d}t\langle\psi_n(\boldsymbol{R}(t))|\frac{\partial}{\partial t}|\psi_n(\boldsymbol{R}(t))\rangle.$$

(参阅 §1.2,(18)式).

含时相变换中的相因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta(\tau)}$,如 Simon 那样[9],可以从 Hilbert 空间中态矢的自然联接(natural connection)法则来理解.在量子力学中,一个量子态用 Hilbert 空间中保持归一化的矢量 $|\psi(t)\rangle$来描述,

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1. \tag{7}$$

这里$|\psi(t)\rangle$有一个相位不定性,人们可以乘上一个含时相因子,而归一化条件仍然成立,即

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta(t)}|\tilde{\psi}(t)\rangle, \tag{8}$$

显然,

$$\langle\tilde{\psi}(t)|\tilde{\psi}(t)\rangle = 1 \tag{9}$$

仍成立.视 t 为参数,按自然联接法则,

$$\langle\psi(t)|\psi(t+\varepsilon)\rangle = 1 + O(\varepsilon^2) \tag{10}$$

ε 为无穷小量.用下式

$$\begin{aligned}|\psi(t+\varepsilon)\rangle &= |\psi(t)\rangle + \varepsilon\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle + O(\varepsilon^2)\\ &= |\psi(t)\rangle + \varepsilon\Big[\mathrm{i}\dot{\beta}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta(t)}|\tilde{\psi}(t)\rangle\\ &\quad + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta(t)}\cdot\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle\Big] + O(\varepsilon^2)\end{aligned}$$

代入(10)式,可得

$$\dot{\beta} = \langle\tilde{\psi}(t)|\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle.$$

积分后,得

$$\beta(\tau) = \int_0^{\tau}\mathrm{d}t\langle\tilde{\psi}(t)|\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle, \tag{11}$$

[9] Simon B. Phys. Rev. Lett., 1983, 51: 2167.

与(6)式相同.

为进一步阐明 AA 相的物理含义,下面先讨论几个具体例子.

例 1 考虑一维谐振子,

$$\hat{H} = p^2/2m + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \tag{12}$$

其本征态与本征值分别为 $|\psi_n\rangle$, $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$, $n = 0, 1, 2, \cdots$. 设初态

$$|\psi(0)\rangle = \cos\theta/2|\psi_0\rangle + \sin\theta/2|\psi_1\rangle, \tag{13}$$

即基态 $|\psi_0\rangle$ 和第一激发态的叠加,参数 θ 刻画两个态的成份. 显然,

$$|\psi(t)\rangle = \cos\theta/2\cdot e^{-i\omega t/2}|\psi_0\rangle + \sin\theta/2\cdot e^{-i3\omega t/2}|\psi_1\rangle. \tag{14}$$

$\theta = 0$ 或 π,表示 $|\psi(t)\rangle$ 为定态,而 $\theta = \pi/2$ 则意味着 $|\psi_0\rangle$ 和 $|\psi_1\rangle$ 等权叠加,即为完全非定态. 在经历一周期 $\tau = 2\pi/\omega$ 后, $|\psi(\tau)\rangle = -|\psi(0)\rangle$,即总相变化 $\phi = \pi$. 用(14)式代入(5)式可求出

$$\alpha(\tau) = \pi\cos\theta, \tag{15}$$

因而

$$\begin{aligned}\beta(\tau) &= \phi - \alpha(\tau) = \pi(1 - \cos\theta)\\ &= \begin{cases}0, \text{对于 } \theta = 0, \text{或 } \pi(\text{定态}),\\ \pi, \text{对于 } \theta = \pi/2(\text{完全非定态}).\end{cases}\end{aligned} \tag{16}$$

即对于定态,AA 相为 0,而对于完全非定态,AA 相达到极大值 π.

上述结论对于任何两态体系均成立. 设

$$\hat{H}|\psi_\pm\rangle = \pm|E||\psi_\pm\rangle, \tag{17}$$

即 $|\psi_\pm\rangle$ 分别对应于能量本征值 $\pm|E|$. 设体系初态为

$$|\psi(0)\rangle = \cos\theta/2|\psi_-\rangle + \sin\theta/2|\psi_+\rangle, \tag{18}$$

则

$$|\psi(t)\rangle = \cos\theta/2 e^{i|E|t/\hbar}|\psi_-\rangle + \sin\theta/2 e^{-i|E|t/\hbar}|\psi_+\rangle. \tag{19}$$

容易算出,在经历一周期 $\tau = \pi\hbar/|E|$ 后, $|\psi(\tau)\rangle = -|\psi(0)\rangle$,即总相变化 $\phi = \pi$,而

$$\alpha(\tau) = \pi\cos\theta \tag{20}$$

$$\beta(\tau) = \pi(1-\cos\theta) = \begin{cases} 0, 对于\ \theta = 0, 或\ \pi(定态), \\ \pi, 对于\ \theta = \pi/2(完全非定态). \end{cases} \tag{21}$$

由上述分析可以看出,对于两个定态叠加成的状态,AA 相可作为刻画非定态性的程度.即对于定态,AA 相为 0,对于非定态,AA 相就出现,而对于完全非定态,AA 相达到其极大值 π.从这个意义上讲,AA 相不妨称为"非定态相"(nonstationary phase),而"动力学相"则可称为"定态相"(stationary phase).

例 2 Schrödinger 相干态[10].

设谐振子的初态波函数形状与基态相同,但波包中心在偏离

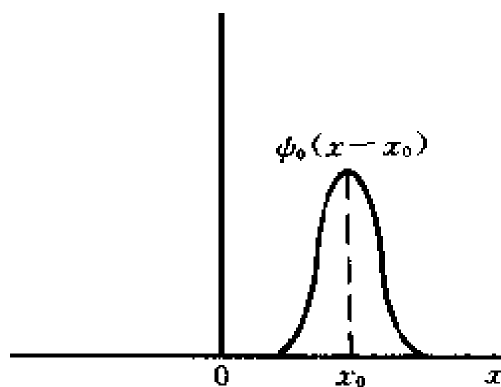


图 1.3

谐振子势平衡点($x=0$)间距 x_0 处(图 1.3),

$$\langle x|\psi(0)\rangle = \psi_0(x-x_0) = \mathrm{e}^{-\delta^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\delta^n}{\sqrt{n!}}\psi_n(x) \tag{22}$$

$$\delta = \alpha x_0/\sqrt{2}, \alpha = \sqrt{m\omega/\hbar} = l^{-1}$$

l 是谐振子势的特征长度.经过计算(见文献[6],Schiff,p.75),可求出

---

[10] Schrödinger E. Naturwissenschaften, 1926, **14**: 664.

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/4}}\exp\Big[-\frac{1}{2}(\alpha x-\sqrt{2}\delta\cos\omega t)^2$$

$$-\mathrm{i}\Big(\frac{1}{2}\omega t-\frac{1}{2}\delta^2\sin 2\omega t\Big)\Big], \tag{23}$$

$$|\langle x|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\exp[-\alpha^2(x-x_C(t))^2],$$

$$x_C(t) = x_0\cos\omega t. \tag{24}$$

这是一个振荡波包(围绕 $x=0$ 点),不扩散,振幅为 x_0,频率为 ω,与经典谐振子的自然振动相似. 经历一周期 $\tau = 2\pi/\omega$ 后,$\langle x|\psi(\tau)\rangle = -\langle x|\psi(0)\rangle$,即总相变化 $\phi=\pi$. 用(23)式代入(5)式,可求出

$$\alpha(\tau) = 2\pi(\delta^2+1/2) \tag{25}$$

$$\beta(\tau) = \phi-\alpha(\tau) = 2\pi\delta^2 = \begin{cases}0, \text{对于 } \delta = 0(\text{定态}),\\ \pi, \text{对于 } \delta = 1/\sqrt{2}(\text{即 } x_0 = l).\end{cases} \tag{26}$$

即对于定态($\delta=0$,$\langle x|\psi(0)\rangle=\psi_0(x)$,$\beta(\tau)=0$,而对于 $x_0=l$ 的相干态,$\beta(\tau)$达到极大值. 这种与经典谐振子自然振动相应的量子波包,可认为是完全非定态.

例 3 平面转子的相干态[11].

平面转子的 Hamilton 量表示为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}, \tag{27}$$

I 为转动惯量,能量本征态和本征值为

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}, m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

$$E_m = \frac{m^2\hbar^2}{2I}. \tag{28}$$

---

[11] Porter W S. Am. J. Phys., 1993, 61: 1050.

设初态为

$$\langle\varphi|\psi(0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_m(\varphi)+\psi_{m'}(\varphi)],m'\neq m \tag{29}$$

是两个定态的等权叠加态,即完全非定态.显然

$$\langle\varphi|\psi(t)\rangle=\frac{1}{2\sqrt{\pi}}[\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi-\mathrm{i}\frac{\hbar t}{2I}m^2}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}m'\varphi-\mathrm{i}\frac{\hbar t}{2I}m'^2}], \tag{30}$$

而

$$|\langle\varphi|\psi(t)\rangle|^2=\frac{1}{\pi}\cos^2[N(\varphi-\varphi_c(t))],N=m-m',$$

$$\varphi_c(t)=\Omega t,\Omega=\frac{\hbar}{2I}(m+m'). \tag{31}$$

可以看出,波包的极大点(对 $N=1$ 情况,只有一个极大)以匀角速率 Ω(经典平面转子角速率)旋转,不扩散.经历一周期 $\tau=2\pi\hbar/(E_m-E_{m'})$(设 $m>m'$)后,总相变化为

$$\phi=-E_c\tau/\hbar+\pi,E_c=\frac{1}{2}(E_m+E_{m'}). \tag{32}$$

用(30)式代入(5)式,可求出

$$\begin{aligned}\alpha(\tau)&=-E_c\tau/\hbar,\\ \beta(\tau)&=\phi-\alpha(\tau)=\pi.\end{aligned} \tag{33}$$

以下作一般的论证.

按量子力学的基本假定,量子态 $|\psi(t)\rangle$ 随时间的演化遵守 Schrödinger 方程.

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle=\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle, \tag{34}$$

其一般解可表示成

$$\psi(t)\rangle=\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t\mathrm{d}t'\hat{H}(t')\right]|\psi(0)\rangle. \tag{35}$$

设经过一个周期 τ 后

$$|\psi(\tau)\rangle = e^{i\phi}|\psi(0)\rangle, \tag{36}$$

ϕ 为总相变化. 显然,

$$e^{i\phi} = \langle\psi(0)|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^\tau dt\hat{H}(t)\right]|\psi(0)\rangle \tag{37}$$

按照 Aharonov-Anandan, 把 ϕ 分为两部分, 即"动力学相"和"几何相"(参见(5)、(6)式).

对于不含时 $\hat{H}$, 不妨用 $\hat{H}$ 本征态 $|\psi_m\rangle$($\hat{H}|\psi_m\rangle = E_m|\psi_m\rangle$)展开初态,

$$|\psi(0)\rangle = \sum_m C_m|\psi_m\rangle, C_m = \langle\psi_m|\psi(0)\rangle, \tag{38}$$

则

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m C_m e^{-iE_m t}|\psi_m\rangle \tag{39}$$

用(39)式代入(5)式, 可求出"动力学相"为

$$\alpha(\tau) = -\sum_m |C_m|^2 E_m\tau/\hbar = -\bar{E}\tau/\hbar \tag{40}$$

则总相变化 ϕ 为

$$e^{i\phi} = \sum_m |C_m|^2 e^{-iE_m\tau/\hbar} \tag{41}$$

$$\beta(\tau) = \phi - \alpha(\tau). \tag{42}$$

一般说来, $\phi \neq \alpha(\tau)$, $\beta(\tau) \neq 0$. 除非 $C_m = \delta_{mn}$(定态), 此时 $\phi = \alpha(\tau) = -E_n\tau/\hbar$, $\beta(\tau) = 0$.

对于 $\hat{H}$ 含时的体系, 即使在绝热近似下, 体系不存在严格的定态, 因而 AA 相就可能出现.

1.4 Berry 相, AA 相与 Lewis 相的关系[12]

§1.1 中已提到, 含时不变量 $\hat{I}(t)$ 的本征值不随时间变化而其本征态一般不满足 Schrödinger 方程. 假设包含 $\hat{I}(t)$ 在内的一组

---

〔12〕 Zeng J Y, Lei Y A. Phys. Lett., 1996, A.215: 239.

守恒量完全集的共同本征方程为

$$\hat{I}|\lambda\kappa,t\rangle = \lambda|\lambda\kappa,t\rangle \tag{1}$$

则 $\mathrm{d}\lambda/\mathrm{d}t=0$，但 $\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle=\hat{H}|\lambda\kappa,t\rangle$ 并不成立．然而可以作一个含时相变换 $|\widetilde{\lambda\kappa},t\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_{\lambda\kappa}(t)}|\lambda\kappa,t\rangle$，要求 $\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\widetilde{\lambda\kappa},t\rangle=\hat{H}|\widetilde{\lambda\kappa},t\rangle$，则可得

$$\alpha_{\lambda\kappa}(t) = \int_0^t \mathrm{d}t'\langle\lambda\kappa,t'|\,\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t'}-\frac{\hat{H}(t')}{\hbar}|\lambda\kappa,t'\rangle,$$

$$\alpha_{\lambda\kappa}(0) = 0. \tag{2}$$

此方法可以推广．设归一化的态矢 $|\Phi(t)\rangle$（$\langle\Phi(t)|\Phi(t)\rangle=1$）并不满足 Schrödinger 方程，我们不妨作一含时相变换，令

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}f(t)}|\Phi(t)\rangle,\quad f(0)=0, \tag{3}$$

并要求 $|\psi(t)\rangle$ 按 Schrödinger 方程演化，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle. \tag{4}$$

把(3)式代入(4)式，对 t 积分，可得

$$f(t) = \int_0^t \mathrm{d}t'\langle\Phi(t')|\,\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t'}|\Phi(t')\rangle + \int_0^t \mathrm{d}t'\langle\psi(t')|\frac{-\hat{H}(t')}{\hbar}|\psi(t')\rangle, \tag{5}$$

假设 $H(t)$ 不含对 t 微商的算符，则 $f(t)$ 可改写成

$$f(t) = \int_0^t \mathrm{d}t'\langle\Phi(t')|\,\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t'}-\frac{H(t')}{\hbar}|\Phi(t')\rangle, \tag{6}$$

与(2)式相似．注意，$|\Phi(t)\rangle$ 不满足 Schrödinger 方程，而 $|\psi(t)\rangle$ 则满足，含时相因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}f(t)}$ 的出现是由于要求 $|\psi(t)\rangle$ 满足 Schrödinger 动力学方程．如 $|\Phi(t)\rangle$ 已经满足 Schrödinger 方程，则 $f(t)=0$．因此归根到底，$f(t)$ 的来源是动力学性质的．下面按照此精神，可以很容易导出 Berry 相和 AA 相．

Berry 绝热相．

设体系 Hamilton 量为 $\hat{H}(\boldsymbol{R}(t))$，参数 $\boldsymbol{R}(t)$ 极缓慢地周期演

化，$\boldsymbol{R}(\tau)=\boldsymbol{R}(0)$，因而 $\hat{H}(\boldsymbol{R}(\tau))=\hat{H}(\boldsymbol{R}(0))$. $\boldsymbol{R}(t)$在$[0,\tau]$期间在参数空间中绕过一闭曲线 C. $\hat{H}(\boldsymbol{R}(t))$的瞬时本征方程为

$$\begin{aligned}&\hat{H}(\boldsymbol{R}(t))|\psi_m(\boldsymbol{R}(t))\rangle = E_m(\boldsymbol{R}(t))|\psi_m(\boldsymbol{R}(t))\rangle,\\&\langle\psi_m(\boldsymbol{R}(t))|\psi_{m'}(\boldsymbol{R}(t))\rangle = \delta_{mm'}.\end{aligned}\tag{7}$$

设初态

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_n(\boldsymbol{R}(0))\rangle,\tag{8}$$

则在绝热近似下，

$$|\psi(t)\rangle \propto |\psi_n(\boldsymbol{R}(t))\rangle.\tag{9}$$

但注意，作为 $\hat{H}(\boldsymbol{R}(t))$的瞬时本征态（$t$ 看成参数！），$|\psi_n(\boldsymbol{R}(t))\rangle$并不满足 Schrödinger 方程. 但不妨作一个含时相变换，令

$$|\psi(t)\rangle = e^{if_n(t)}|\psi_n(\boldsymbol{R}(t))\rangle,\tag{10}$$

并要求$|\psi(t)\rangle$满足 Schrödinger 方程，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(\boldsymbol{R}(t))|\psi(t)\rangle,\tag{11}$$

用(10)式代入(11)式，对 t 积分，可得出

$$\begin{aligned}f_n(t) &= \int_0^t dt'\langle\psi_n(\boldsymbol{R}(t'))|i\frac{\partial}{\partial t'}|\psi_n(\boldsymbol{R}(t'))\rangle\\&\quad-\int_0^t dt'\ \frac{1}{\hbar}E_n(\boldsymbol{R}(t')).\end{aligned}\tag{12}$$

在经历一周期后，

$$|\psi(\tau)\rangle = e^{if_n(\tau)}|\psi_n(\boldsymbol{R}(\tau))\rangle.\tag{13}$$

注意，$\boldsymbol{R}(\tau)=\boldsymbol{R}(0)$，$\hat{H}(\boldsymbol{R}(\tau))=\hat{H}(\boldsymbol{R}(0))$，$\boldsymbol{R}(t)$是作为一参数出现在 $\hat{H}$ 中. 当参数还原时，Hamilton 量也还原. 因此，通常取

$$|\psi_n(\boldsymbol{R}(\tau))\rangle = |\psi_n(\boldsymbol{R}(0))\rangle,\tag{14}$$

即无相位变化. 这样，

$$\begin{aligned}|\psi(\tau)\rangle &= e^{if_n(\tau)}|\psi_n(\boldsymbol{R}(\tau))\rangle\\&= e^{if_n(\tau)}|\psi_n(\boldsymbol{R}(0))\rangle = e^{if_n(\tau)}|\psi(0)\rangle,\end{aligned}\tag{15}$$

即$|\psi(\tau)\rangle$又回到初态$|\psi(0)\rangle$，但有一个相因子 $e^{if_n(\tau)}$，

$$f_n(\tau) = \alpha_n(\tau) + \beta_n(\tau),\tag{16}$$

$$\alpha_n(\tau) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^\tau dt E_n(\boldsymbol{R}(t)), \tag{17}$$

$$\begin{aligned} \beta_n(\tau) &= \int_0^\tau dt \langle \psi_n(\boldsymbol{R}(t)) | \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} | \psi_n(\boldsymbol{R}(t)) \rangle \\ &= \mathrm{i}\int_{\boldsymbol{R}(0)}^{\boldsymbol{R}(\tau)} d\boldsymbol{R} \cdot \langle \psi_n(\boldsymbol{R}) | \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} | \psi_n(\boldsymbol{R}) \rangle \\ &= \int_C d\boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R}), \end{aligned} \tag{18}$$

$$\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R}) = \mathrm{i}\langle \psi_n(\boldsymbol{R}) | \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} | \psi_n(\boldsymbol{R}) \rangle$$

或

$$\beta_n(C) = \int_C d\boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R}) = \iint_S [\nabla_{\boldsymbol{R}} \times \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R})] \cdot d\boldsymbol{S} \tag{19}$$

其中 $\alpha_n(\tau)$即“动力学相”，而 $\beta_n(\tau)$或 $\beta_n(C)$就是“Berry 绝热相”.

这里值得再提一下，$|\psi_n(\boldsymbol{R}(t))\rangle$或 $e^{i\alpha_n(t)}|\psi_n(\boldsymbol{R}(t))\rangle$都不满足 Schrödinger 方程，只当加上 $e^{i\beta_n(t)}$之后，

$$e^{i[\alpha_n(t)+\beta_n(t)]}|\psi_n(\boldsymbol{R}(t))\rangle = e^{i\gamma_n(t)}|\psi_n(\boldsymbol{R}(t))\rangle \tag{20}$$

才满足 Schrödinger 方程. $\beta_n(t)$相的出现完全出自动力学上的要求.

AA 相

设量子态$|\psi(t)\rangle$按 Schrödinger 演化，周期为 τ，

$$|\psi(\tau)\rangle = e^{i\phi}|\psi(0)\rangle \tag{21}$$

经周期演化后，总相变化为 ϕ. 按 Aharonov-Anandan 作法，令

$$|\psi(t)\rangle = e^{if(t)}|\tilde{\psi}(t)\rangle, \tag{22}$$

要求

$$|\tilde{\psi}(\tau)\rangle = |\tilde{\psi}(0)\rangle, \tag{23}$$

即$|\tilde{\psi}(t)\rangle$经过一周期演化后，无相位变化（注意，与(14)式比较，是有启发的），但$|\tilde{\psi}(t)\rangle$的演化并不遵守 Schrödinger 方程，（试与 $\hat{H}(\boldsymbol{R}(t))$的瞬时本征态也不遵守 Schrödinger 方程比较！）. 用(22)

式代入 Schrödinger 方程,可得出

$$\phi = f(\tau) = \alpha(\tau) + \beta(\tau) \tag{24}$$

$$\alpha(\tau) = \int_0^{\tau} dt \langle \psi(t) | \frac{-\hat{H}(t)}{\hbar} | \psi(t) \rangle, \tag{25}$$

$$\beta(\tau) = \int_0^{\tau} dt \langle \tilde{\psi}(t) | i \frac{\partial}{\partial t} | \tilde{\psi}(t) \rangle. \tag{26}$$

这正是 Aharonov-Anandan 给出的“动力学相”和“几何相”.

1.5 二态体系的非绝热相

二态体系是最简单的量子力学体系,其量子态随时间的演化比较简单.下面讨论它们的相位变化规律[13].

1.5.1 瞬时本征态

设二态体系的 Hamilton 量为

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t). \tag{1}$$

设 $\hat{H}_0$ 本征方程为

$$\hat{H}_0 | \phi_{\pm} \rangle = \pm \Delta | \phi_{\pm} \rangle, \tag{2}$$

$\pm\Delta$(实)为 $\hat{H}_0$ 的两个本征值.以下采用 $\hat{H}_0$ 表象,

$$| \phi_- \rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, | \phi_+ \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{H}_0 = \begin{pmatrix} -\Delta & 0 \\ 0 & \Delta \end{pmatrix}, \tag{3}$$

而 $\hat{H}'(t)$表示为

$$\hat{H}'(t) = \begin{pmatrix} 0 & -W(t) \\ -W^*(t) & 0 \end{pmatrix}$$

[13] Lei Y A, Zeng J Y. Commu. Theor. Phys., 1997, 27: 435.

$$= \begin{pmatrix} 0 & -|W(t)|e^{i\gamma(t)} \\ -|W(t)|e^{-i\gamma(t)} & 0 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

$H(t)$的瞬时(instantaneous)本征态表为$\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$,本征方程为

$$\begin{pmatrix} -\Delta & -W(t) \\ -W^*(t) & \Delta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}. \tag{5}$$

容易求出瞬时本征值及相应的瞬时本征态分别为

$$E_{\mp} = \mp\sqrt{\Delta^2 + |W(t)|^2}, \tag{6}$$

$$\begin{aligned} |\psi_-(t)\rangle &= \cos\theta/2|\phi_-\rangle - \sin\theta/2e^{-i\gamma}|\phi_+\rangle, \\ |\psi_+(t)\rangle &= -\sin\frac{\theta}{2}|\phi_-\rangle + \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\gamma}|\phi_+\rangle, \end{aligned} \tag{7}$$

$$\tan\theta = |W(t)|/\Delta \tag{8}$$

$|\psi_\pm(t)\rangle$是正交归一化的.(7)式之逆为

$$\begin{aligned} |\phi_-\rangle &= \cos\theta/2|\psi_-(t)\rangle - \sin\frac{\theta}{2}|\psi_+(t)\rangle, \\ |\phi_+\rangle &= e^{i\gamma}\left[\sin\frac{\theta}{2}|\psi_-(t)\rangle + \cos\frac{\theta}{2}|\psi_+(t)\rangle\right], \end{aligned} \tag{9}$$

二态体系的量子态总可以用$\hat{H}(t)$的两个瞬时本征态$|\psi_\pm(t)\rangle$来展开.但注意,$|\psi_\pm(t)\rangle$随时间的演化并不满足含时Schrödinger方程,所以展开系数依赖于t.在磁共振情况下(参阅§1.2,例),容易找出含时Schrödinger方程的解析解.在一般情况下,不一定能找出解析解,但可以用数字积分求出其精确解(见下§1.5.4).在此之前,我们先讨论两种极端情况.

1.5.2 瞬动近似(impulsive approximation)

设

$$W(t) = W^*(t) = W_0\varepsilon(t), (W_0 \text{为实常数})$$

$$\varepsilon(t) = \begin{cases} 0, t < 0 \\ 1, t > 0. \end{cases} \tag{10}$$

设体系初态处于 $\hat{H}_0$ 的较低能态

$$|\psi(0)\rangle = |\phi_-\rangle. \tag{11}$$

注意，当 $t>0$，$|\phi_-\rangle$并非 $\hat{H}(t)$的瞬时本征态. 事实上，

$$|\psi(0)\rangle = |\phi_-\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\psi_-(0)\rangle - \sin\frac{\theta}{2}|\psi_+(0)\rangle, \tag{12}$$

考虑到 $\tan\theta = W_0/\Delta$ 和 $E_{\mp} = \mp\sqrt{\Delta^2 + W_0^2}$ 都不依赖于 t，容易求出（注意，$\gamma = 0$）

$$|\psi(t)\rangle = \cos\theta/2 e^{-iE_- t/\hbar}|\psi_-(0)\rangle - \sin\frac{\theta}{2}e^{-iE_+ t/\hbar}|\psi_+(0)\rangle. \tag{13}$$

$|\psi(t)\rangle$作周期演化，$\tau = 2\pi/\omega = 2\pi\hbar/(E_+ - E_-) = \pi\hbar/\sqrt{\Delta^2 + W_0^2} = \pi\hbar/|E|$. 容易求出$|\psi(\tau)\rangle = -|\psi(0)\rangle$，即经历一周期后总相变化为 $\phi = \pi$. 利用波函数（13）式，可求出能量平均值 $\bar{E} = \cos^2\theta/2 E_- + \sin^2\theta/2 E_+ = -\cos\theta|E|$，因此经历一周期后"动力学相"（参阅 § 1.3，式(5)）

$$\alpha(\tau) = -\bar{E}\tau/\hbar = \frac{|E|\tau}{\hbar}\cos\theta = \pi\cos\theta, \tag{14}$$

而 AA 相为

$$\beta(\tau) = \phi - \alpha(\tau) = \pi(1 - \cos\theta), \tag{15}$$

其形式与磁共振中的 Berry 绝热相相似，但物理含义不同. 不妨称为瞬动相（impulsive phase）.

可以看出，当 $W_0/\Delta \ll 1$（即 $\theta \ll 1$，微扰瞬动）时

$$\beta(\tau) \approx \frac{\pi}{2}(W_0/\Delta)^2. \tag{16}$$

而当

$$W_0/\Delta \gg 1 (W_0 \to \infty，或\ \Delta \to 0)\ 时，\beta(\tau) \approx \pi. \tag{17}$$

$\beta(\tau)$随(W_0/Δ)的变化如图 1.4(a).

由(13)式还可求出在 t 时刻测得粒子处于$|\phi_+\rangle$态和$|\phi_-\rangle$态的概率分别为（见图 1.4(b)）.

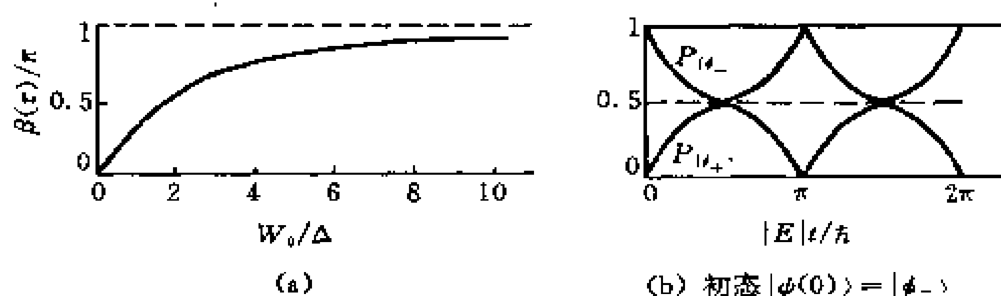


图 1.4

$$
\begin{aligned}
P_{|\phi_+\rangle} &= \sin^2\theta \cdot \sin^2(|E|t/\hbar), \\
P_{|\phi_-\rangle} &= 1 - \sin^2\theta \cdot \sin^2(|E|t/\hbar).
\end{aligned}
\tag{18}
$$

1.5.3 绝热近似

一般体系的绝热相已在§1.2中讨论过了.对于二态体系,可以证明,在下列情况下,$W(t)=|W(t)|e^{i\gamma}$,γ不依赖于t,如$W(t)$随t变化极缓慢,则Berry绝热相为0.

证明

设体系初态$|\psi(0)\rangle=|\psi_-(0)\rangle$,则绝热近似解为

$$
|\psi(t)\rangle = e^{i\beta_-(t)-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_-(t')}|\psi_-(t)\rangle, \tag{19}
$$

代入Schrödinger方程,并对t积分,可得

$$
\beta_-(t) = i\int_0^t dt' \langle\psi_-(t')|\frac{\partial}{\partial t'}|\psi_-(t')\rangle.
$$

利用(7)式,$|\phi_-(t)\rangle=\cos\dfrac{\theta}{2}|\phi_-\rangle-\sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\gamma}|\phi_+\rangle$,式中$\tan\theta=|W(t)|/\Delta$.

所以

$$
\frac{\partial}{\partial t}|\psi_-(t)\rangle = -\frac{\dot\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}|\phi_-\rangle - \frac{\dot\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\gamma}|\phi_+\rangle,
$$

$$
\langle\psi_-(t)|\frac{\partial}{\partial t}|\psi_-(t)\rangle = 0, \tag{20}
$$

所以 $\beta_-(t)=0$.

特例 1 设 $W(t)=W_0(1-\mathrm{e}^{-t/\tau_0})=W(t)^*$, $\tau_0\gg\hbar/\Delta$(绝热变化), $W(0)=0$, $\theta=0$, 所以, 初条件 $|\psi(0)\rangle=|\psi_-(0)\rangle=|\phi_-\rangle$. 容易证明, $\beta_-(t)=0$.

特例 2 设 $W(t)=W_0\sin\omega t=W(t)^*$, $\omega\ll\Delta/\hbar$(绝热变化), $W(0)=0$, $\theta=0$, 同样, 初条件, $|\psi(0)\rangle=|\psi_-(0)\rangle=|\phi_-\rangle$, $\beta_-(t)=0$.

特例 3 设 $W(t)=W_0\cos\omega t=W(t)^*$, $\omega\ll\Delta/\hbar$(绝热变化). 但注意, $W(0)\neq0$, 所以 $|\psi_-(0)\rangle\neq|\phi_-\rangle$. 若初态 $|\psi(0)\rangle=|\psi_-(0)\rangle$, 则 $\beta_-(t)=0$ 仍成立. 但如

$$|\psi(0)\rangle=|\phi_-\rangle$$
$$=\cos\frac{1}{2}\theta(0)|\psi_-(0)\rangle+\sin\frac{1}{2}\theta(0)|\psi_+(0)\rangle,$$
$$\tan\theta(t)=W_0\cos\omega t/\Delta,$$

初态并不处于 $\hat{H}(t)$的某一瞬时本征态, 则 $\beta_-(t)$并不为 0.

1.5.4 一般情况

一般情况下, 二态体系的解可以用两个瞬时本征态展开,

$$|\psi(t)\rangle=a_-(t)|\psi_-(t)\rangle+a_+(t)|\psi_+(t)\rangle,\tag{21}$$

$a_\pm(0)$由初态 $|\psi(0)\rangle$决定,

$$a_-(0)=\langle\psi_-(0)|\psi(0)\rangle,a_+(0)=\langle\psi_+(0)|\psi(0)\rangle.\tag{22}$$

把(21)式代入含时 Schrödinger 方程, 得

$$\begin{aligned}\dot{a}_-+\left(D_{--}+\frac{\mathrm{i}E_-}{\hbar}\right)a_-+D_{-+}a_+=0\\ \dot{a}_++\left(D_{-+}+\frac{\mathrm{i}E_+}{\hbar}\right)a_++D_{+-}a_-=0\end{aligned}\tag{23}$$

式中

$$D_{\mu\nu}(t)=\langle\psi_\mu(t)|\frac{\partial}{\partial t}|\psi_\nu(t)\rangle,\mu,\nu=+,-.\tag{24}$$

一般可用数字积分求解(23)式,得出一般解(21).

设 $\hat{H}(t)$ 循环演化,周期为 τ,即

$$\hat{H}(\tau) = \hat{H}(0). \tag{25}$$

通常在 τ 时刻的瞬时本征态取得与初始($t=0$)时刻相同,

$$|\psi_\mu(\tau)\rangle = |\psi_\mu(0)\rangle, \mu = +, -. \tag{26}$$

这样,可得出

$$|\psi(\tau)\rangle = \sum_{\mu=-,+} a_\mu(\tau)|\psi_\mu(0)\rangle. \tag{27}$$

可以看出,即使初态处于某瞬时本征态,$|\psi(\tau)\rangle$ 一般并不能保持在该瞬时本征态,除非是绝热近似成立.例如,$|\psi(0)\rangle = |\psi_-(0)\rangle$ ($a_\mu(0)=\delta_{\mu-}$),并不能保证 $a_\mu(\tau)=\delta_{\mu-}$.只有在某些特殊情况下,$a_+(\tau)=0$,$|\psi(\tau)\rangle = a_-(\tau)|\psi_-(\tau)\rangle = a_-(\tau)|\psi_-(0)\rangle = a_-(\tau)|\psi(0)\rangle$,$|\psi(\tau)\rangle$ 才回到初态,但有一个相位变化.

在绝热近似下,$D_{\mu\nu}=0(\mu\neq\nu)$,方程(23)化为

$$\dot{a}_\mu + \left(D_{\mu\mu} + \frac{\mathrm{i}E_\mu}{\hbar}\right)a_\mu = 0, \quad \mu = +, -. \tag{28}$$

积分,得

$$a_\mu(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}[\alpha_\mu(t)+\beta_\mu(t)]}a_\mu(0), \tag{29}$$

式中

$$\alpha_\mu(t) = \frac{1}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t' E_\mu(t'), \tag{30}$$

$$\beta_\mu(t) = \mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}t' D_{\mu\mu}(t'), \tag{31}$$

通常称为“动力学相”和绝热相.

设初态为某瞬时本征态,$|\psi(0)\rangle = |\psi_\mu(0)\rangle$,则绝热近似解

$$\begin{aligned}|\psi(\tau)\rangle_{\mathrm{adi}} &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}[\alpha_\mu(\tau)+\beta_\mu(\tau)]}|\psi_\mu(\tau)\rangle \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}[\alpha_\mu(\tau)+\beta_\mu(\tau)]}|\psi(0)\rangle.\end{aligned} \tag{32}$$

总是回到初态,但多一个相位因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\alpha_\mu(\tau)+\beta_\mu(\tau)]}$.

然而如初态为**瞬时本征态的叠加**

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{\mu=-,+} a_\mu(0)|\psi_\mu(0)\rangle, \tag{33}$$

则绝热近似解为

$$|\psi(t)\rangle_{\text{adi}} = \sum_{\mu=-,+} a_\mu(0)e^{i[\alpha_\mu(t)+\beta_\mu(t)]}|\psi_\mu(t)\rangle. \tag{34}$$

在此情况下,$|\psi(\tau)\rangle_{\text{adi}}$并不一定能回到初态$|\psi(0)\rangle$.

应当注意,如放弃绝热近似,虽然一般解仍可表示成$|\psi(t)\rangle = \sum_{\mu=-,+} a_\mu(t)|\psi_\mu(t)\rangle$,其展开系数却不能简单表示成(29)到(31)式.然而,人们还是可以在$\arg a_\mu(t)$中把"动力学相"减去,把剩下部分称为"非绝热相"

$$\beta_\mu(t) = \arg a_\mu(t) - \int_0^t dt' \frac{-E_\mu(t')}{\hbar}, \tag{35}$$

它在绝热近似下将回到(31)式.如$|\psi(t)\rangle$的演化是循环的,$|\psi(\tau)\rangle = e^{i\phi}|\psi(0)\rangle$,则经历一周期后,非绝热相为

$$\beta(\tau) = \phi - \alpha(\tau),$$

$$\alpha(\tau) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^\tau \langle\psi(t)|\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle dt. \tag{36}$$

例 1 磁共振(参阅§1.2,例)

利用瞬时本征态(§1.2,(36)式)可计算出

$$D_{++} = -i\omega_0(1+\cos\theta),$$

$$D_{--} = -i\omega_0(1-\cos\theta),$$

$$D_{+-} = D_{-+} = -i\omega_0\sin\theta,$$

式中$\tan\theta = B_1/B_0 = \omega_1/\omega_0$.此时,方程(23)中的系数都不依赖于$t$,

$$\dot{a}_- - i[\sqrt{\omega_0^2+\omega_1^2} + \omega_0(1-\cos\theta)]a_- - i\omega_0\sin\theta a_+ = 0,$$

$$\dot{a}_+ + i[\sqrt{\omega_0^2+\omega_1^2} - \omega_0(1+\cos\theta)]a_+ - i\omega_0\sin\theta a_- = 0. \tag{37}$$

容易验证,在初条件$a_-(0)=1, a_+(0)=0$下,非绝热的解析解(见§1.2,(52)式)

$$a_-(t) = (\cos\omega_1 t + \mathrm{i}\sin\theta \cdot \sin\omega_1 t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}$$
$$a_+(t) = \mathrm{i}\cos\theta\sin\omega_1 t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} \tag{38}$$
满足(37)式.

在时刻 t,体系处于 $|\psi_-(t)\rangle$ 的概率为 $P_-(t) = |a_-(t)|^2$,见图 1.5(a)($\omega_1/\omega_0 = 1$ 情况)和(b)($\omega_1/\omega_0 = 10$). 注意:当 $t = n\pi/\omega_1(n = 1, 2, \cdots)$ 时,$P_+(t) = 0$, $P_-(t) = 1$, $|\psi(t)\rangle \sim |\psi_-(t)\rangle$. 但一般说来,$|\psi_-(n\pi/\omega_1)\rangle$ 并不回到初态 $|\psi_-(0)\rangle$,除非 $\omega_1/\omega_0 = n$,($n = 1,2,3,\cdots$),此时 $|\psi_-(n\pi/\omega_1)\rangle = |\psi_-(\pi/\omega_0)\rangle = |\psi_-(\tau)\rangle = |\psi_-(0)\rangle$,$|\psi(\tau)\rangle$ 才回到 $|\psi(0)\rangle$,但有一个总相变化 $\phi = (n+1)\pi$. 相位 $\arg a_-(t)$ 和相应的相位 $\arg a_-(t) - \int_0^t \mathrm{d}t' \dfrac{-E(t')}{\hbar} = \beta_-(t)$ 也画在图 1.5 中. 从图 1.5 可以看出,在 $\omega_1/\omega_0 = 1$ 情况下,绝热相与非绝热相相差很大,而在 $\omega_1/\omega_0 = 10$ 情况下,非绝热相几乎与绝热相 $\beta_-(t) = \omega_0 t(1 - \cos\theta)$ 完全一致.

例 2 考虑自旋为 1/2 的粒子,有磁矩 μ,在(xy)平面内含时的磁场中运动[14],Hamilton 量表示为

$$\hat{H}(t) = \mu[\sigma_x(B_0\cos\omega t + B_1) + \sigma_y B_0\sin\omega t]$$
$$= \mu\begin{pmatrix} 0 & B_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + B_1 \\ B_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + B_1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{39}$$
$$H(\tau) = H(0), \tau = 2\pi/\omega.$$

$\hat{H}(t)$ 的瞬时本征值和本征函数为

$$E_\pm(t) = \pm|E(t)| = \pm\hbar\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2 + 2\omega_0\omega_1\cos\omega t} \tag{40}$$
$$\omega_0 = \mu B_0/\hbar, \omega_1 = \mu B_1/\hbar,$$
$$|\psi_\pm(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\phi_-\rangle \pm \frac{|E(t)|}{\hbar(\omega_1 + \omega_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t})}|\phi_+\rangle\right], \tag{41}$$

---

[14] Lyanda-Geller Y. Phys. Rev. Lett., 1993, 70: 343.

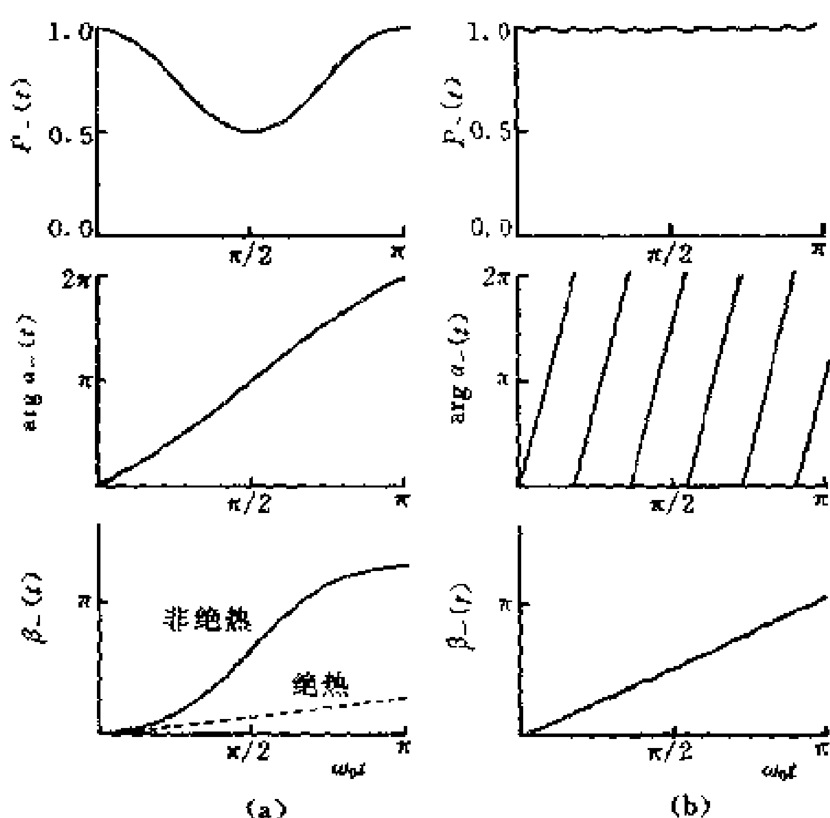


图 1.5　(a)$\omega_1/\omega_0=1$,
(b)$\omega_1/\omega_0=10$.

$$|\psi_\pm(\tau)\rangle = |\psi_\pm(0)\rangle.$$

利用(41)式可求出 $D_{++}=D_{--}=-D_{+-}=-D_{-+}$

$$D_{++}=\frac{\mathrm{i}\omega_0\omega_1(\omega_0+\omega_1\cos\omega t)}{2(\omega_0^2+\omega_1^2+2\omega_0\omega_1\cos\omega t)}. \tag{42}$$

在此情况下的含时 Schrödinger 方程(23)的解析解尚未找出.但可用数字积分求出其精确解.设初态为 $|\psi(0)\rangle=|\psi_-(0)\rangle$,计算结果 $P_-(t)=|a_-(t)|^2$, $\arg a_-(t)$ 和 $\beta_-(t)=\arg a_-(t)-\int_0^t \mathrm{d}t'|E(t')|/\hbar$ 分别画在图 1.6 中.其中图 1.6(a)($\omega/\omega_0=1$)和(b)($\omega/\omega_0=0.3$)属于非绝热情况,$|\psi(\tau)\rangle=|\psi(2\pi/\omega)\rangle$并不恢复为初态.在图 1.6(c)($\omega/\omega_0=0.1$),绝热近似已相当好成立,

$P_-(\tau)\approx P_-(0)=1$，而且 $|\psi(\tau)\rangle=|\psi(2\pi/\omega)\rangle$ 已非常接近于初态 $|\psi(0)\rangle=|\psi_-(0)\rangle$，但有一个绝热相 $\beta_-(\tau)\approx-\pi$.

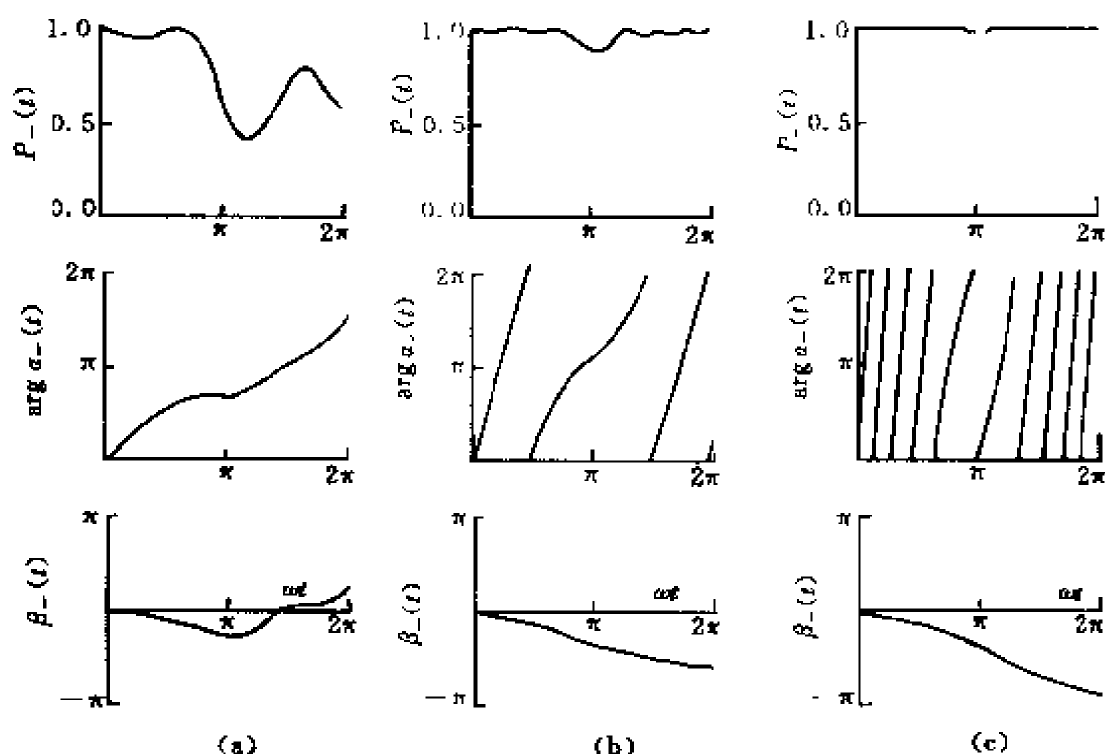


图 1.6　(a) $\omega/\omega_0=1$，

(b) $\omega/\omega_0=0.3$，

(c) $\omega/\omega_0=0.1$.

1.6　Berry 相与 Aharonov-Bohm(AB)相的关系

M.V.Berry 在他著名的文章[4]的最后一节，讨论了 Aharonov-Bohm(AB)效应[15]，论证 AB 相就是他提出的 Berry 相. 但在论证时放弃了绝热近似，而且在分析中似乎未涉及量子态的非定态性(nonstationarity). 下面我们对此作更认真的分析，可以看出，Berry

[15] Aharonov Y, Bohm D. Phys. Rev., 1959, **115**: 485.

的结论是正确的，但论证中似有不完善之处[16].

按照 Berry 同样的思路，考虑一个带电 q 的粒子，限制在一个位于 $\boldsymbol{R}$ 处的匣子内（不妨把匣子看成把带电粒子紧束缚于其中的某种势阱，例如谐振子势阱，$\boldsymbol{R}$ 表示谐振子势的平衡点位置）. Hamilton 量表示为 $\hat{H}_0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R},\hat{\boldsymbol{p}})$，$\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$，$\boldsymbol{R}$ 为参数（粒子位置的参照点）. 能量本征方程为

$$
\begin{aligned}
&\hat{H}_0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R},\hat{\boldsymbol{p}})\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}) \\
&=E_n\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})
\end{aligned}
\tag{1}
$$

E_n 与 $\boldsymbol{R}$ 无关. 定态波函数为 $\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R},t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})$，它严格满足含时 Schrödinger 方程.

现在让匣子（即束缚带电粒子的势阱）绕磁通线（flux line）运动. 此时 $\boldsymbol{R}(t)$ 将随时间而变动. 为清楚起见，先讨论磁通为 0 的情况，然后讨论磁通不为 0 情况，并进行比较.

当匣子在运动时，$\hat{H}_0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t),\hat{\boldsymbol{p}})$ 是含时的，其本征方程

$$
\hat{H}_0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t),\hat{\boldsymbol{p}})\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t))=E_n\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t)) \tag{2}
$$

应视为瞬时本征方程. 如 Berry 指出那样，E_n 不依赖于 $\boldsymbol{R}$. 但应注意，$\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t))$ 是一个运动波包，$|\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t))|^2$ 依赖于时间，所以 $\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t))\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}$ 不再是定态波函数，因为定态波函数所描述的粒子在空间的概率分布是不随时间改变的. 事实上，无论 $\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t))$，或乘上"动力学相因子"的波函数 $\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t))\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}$ 都不满足含时 Schrödinger 方程. 此时，含时 Schrödinger 方程的求解，一般说来是很困难的. 但在绝热近似下，设体系初态为

$$
|\psi(0)\rangle=\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(0)) \tag{3}
$$

则正确的绝热近似解为

$$
|\psi(t)\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta_n(t)-\mathrm{i}E_nt/\hbar}\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t)), \tag{4}
$$

代入含时 Schrödinger 方程

---

[16] 雷奕安，曾谨言. 物理学报，1997，**46**：19.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}_0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t),\hat{\boldsymbol{p}})|\psi(t)\rangle, \tag{5}$$

可求得

$$\beta_n = \langle\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t))|i\frac{\partial}{\partial t}\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t))\rangle. \tag{6}$$

由$\langle\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t))|\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t))\rangle=1$，可证明 β 为实数（Berry 文中认为此 β 值应为 0，见 Berry 文中(34)式后的一句话，这是不妥当的，但这不影响后面的结论）.

现在来讨论磁通$\neq 0$情况. 此时，与 Berry 文中给出的一样，Hamilton 量表示为 $\hat{H}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R},\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))$. 先让匣子不动，$\boldsymbol{R}$ 为常数，设本征方程表示为

$$\hat{H}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R},\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))|n(\boldsymbol{R})\rangle = E_n|n(\boldsymbol{R})\rangle, \tag{7}$$

E_n 不受磁通的影响，但本征函数中多出一个 Dirac 相因子，

$$\langle\boldsymbol{r}|n(\boldsymbol{R})\rangle = \exp\left[-i\frac{q}{c\hbar}\int_{\boldsymbol{R}}^{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\cdot d\boldsymbol{r}'\right]\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}) \tag{8}$$

在 $\boldsymbol{R}$ 不动情况下，定态波函数可表成$\langle\boldsymbol{r}|n(\boldsymbol{R})\rangle e^{-iE_nt/\hbar}$. 设初态$|\psi(0)\rangle=|n(\boldsymbol{R})\rangle$，则$|\psi(t)\rangle=\exp\left[-\frac{iE_nt}{\hbar}\right]n(\boldsymbol{R})\rangle$，它严格满足 Schrödinger 方程.

现在让匣子绕磁通线运动，$\boldsymbol{R}(t)$将随时间而变. 此时，$\hat{H}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t),\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))$含时，而其本征方程

$$\hat{H}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t),\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle = E_n|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle \tag{9}$$

应视为瞬时本征方程. 注意：$\langle\boldsymbol{r}|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle$为一个运动波包，$\langle\boldsymbol{r}|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle e^{-iE_nt/\hbar}$也不是定态. 含时 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t),\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))|\psi(t)\rangle \tag{10}$$

的一般求解是很困难的. 但在绝热近似下，设

$$|\psi(0)\rangle = |n(\boldsymbol{R}(0))\rangle, \tag{11}$$

可以看出$|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle$或 $e^{-iE_n t/\hbar}|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle$都不满足 Schrödinger 方程(10). 正确的绝热近似解应表示为

$$\langle \boldsymbol{r}|\psi(t)\rangle = e^{i(\beta_n(t)+\gamma_n(t))-iE_n t/\hbar}$$
$$\times \exp\left[-\frac{iq}{\hbar c}\int_{\boldsymbol{R}(t)}^{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\cdot d\boldsymbol{r}'\right]\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}(t)), \tag{12}$$

式中 β_n 如(6)式所示. 用(12)式代入(10)式,可得

$$\dot{\gamma}_n = -\frac{q}{\hbar c}\frac{\partial}{\partial t}\int_{\boldsymbol{R}(t)}^{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\cdot d\boldsymbol{r}'. \tag{13}$$

对 t 积分后,得

$$\gamma_n(t) = \frac{q}{\hbar c}\int_{\boldsymbol{R}(0)}^{\boldsymbol{R}(t)} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot d\boldsymbol{r}, \tag{14}$$

而经历一周期 τ 后

$$\gamma_n(\tau) = \gamma_n(C) = \frac{q}{\hbar c}\int_C \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot d\boldsymbol{r} = q\Phi/\hbar c. \tag{15}$$

C 为在$[0,\tau]$期间 $\boldsymbol{R}(t)$(匣子)所扫过的闭曲线,Φ 为穿过 C 的磁通. 这正是 Berry 给出的 AB 相(见 Berry 文中(35)式). 但应注意,在以上论证中用了绝热近似(见(12)式),这似乎会影响到所得结果(AB 相,(15)式)的普适性. 事实上,Aharonov-Bohm 一文[15]的论证中,根本不涉及绝热近似假定. 这样,两种论证之间似有矛盾,实则不然,因为人们总可以认为束缚粒子的匣子的线度很小(例如谐振子势的自然线度$\sqrt{\hbar/m\omega}\to 0$,或球方势阱的半径 $a\to 0$),此时在匣内运动的带电粒子的激发能级与基态的间距$\to\infty$,绝热近似自动成立. 因此所得结果是普遍成立的.

1.7 量子力学中的相位不定性

一般量子力学教材中都提到波函数的相位不定性(phase uncertainty),特别是在讲述波函数的统计诠释时,都会提到此问题. 但一般教材都不再作进一步的深入讨论. 事实上,相位不定性问

题，在量子力学的几条基本原理中都有体现．以下就此作简单的回顾．

（1）波函数的统计诠释

设$|\psi\rangle$描述体系的一个量子态．试作相位变换，$|\psi\rangle \to |\tilde{\psi}\rangle = e^{i\alpha}|\psi\rangle$，（$\alpha$，实常数），则$|\tilde{\psi}\rangle$与$|\psi\rangle$所描述的量子态是完全相同的，这就是所谓的相位不定性．因为在此相位变换下，不仅归一化条件保持不变，$\langle\tilde{\psi}|\tilde{\psi}\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$，而且测量任何力学量的测值概率分布和平均值都保持不变．例如，测量粒子的位置的概率分布，$|\psi\rangle$和$|\tilde{\psi}\rangle$分别用位置本征态展开，

$$|\psi\rangle = \int dx\,|x\rangle\langle x|\psi\rangle,\ |\tilde{\psi}\rangle = \int dx\,|x\rangle\langle x|\tilde{\psi}\rangle,$$

尽管
$$\langle x|\tilde{\psi}\rangle = e^{i\alpha}\langle x|\psi\rangle,$$
但
$$|\langle x|\tilde{\psi}\rangle|^2 = |\langle x|\psi\rangle|^2.$$
其它力学量的测量取值的概率分布也都不改变．

（2）力学量用厄米算符描述

设力学量 F 用厄米算符 $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$ 描述，本征方程为 $\hat{F}|n\rangle = F_n|n\rangle$，本征值 F_n 即测量 F 可能出现的值，$|n\rangle$为相应的本征态（可能态）．$|n\rangle$具有相位不定性，表现为力学量的矩阵表示的不定性．

例如角动量$(\hat{j}^2, \hat{j}_z)$的共同本征态$(\hbar = 1)$，

$$\hat{j}^2|jm\rangle = j(j+1)|jm\rangle,\ j = 0,1,2,\cdots \text{ 或 } 1/2,3/2,5/2,\cdots.$$
$$\hat{j}_z|jm\rangle = m|jm\rangle$$

在 j 给定的子空间（$m = j, j-1, \cdots, -j+1, -j$；$(2j+1)$维）中，作相位变换$|jm\rangle \to |\widetilde{jm}\rangle = e^{i\alpha_m}|jm\rangle$，此时 $\hat{j}_z$ 的矩阵元保持不变，

$$\langle\widetilde{jm'}|\hat{j}_z|\widetilde{jm}\rangle = m\delta_{m'm} = \langle jm'|\hat{j}_z|jm\rangle,$$

但 j_x 和 j_y 的矩阵元要改变，例如

$$\langle\widetilde{jm'}|\hat{j}_x|\widetilde{jm}\rangle = e^{i(\alpha_m - \alpha_{m'})}\langle jm'|\hat{j}_x|jm\rangle.$$

这就是角动量代数中通常提到的 j_x 和 j_y 矩阵表示的相位不定性，

其来源即基矢$|jm\rangle$的相位不定性。事实上，角动量代数中，根据角动量的基本对易式，$\hat{j}_x\hat{j}_y-\hat{j}_y\hat{j}_x=\mathrm{i}\hat{j}_z,\cdots$，只能给出$\hat{j}_x,\hat{j}_y$（或$\hat{j}_\pm=\hat{j}_x\pm\mathrm{i}\hat{j}_y$）的矩阵元的模方（参阅文献[17]，p.405），

$$|\langle jm'|\hat{j}_\pm|jm\rangle|^2=\delta_{m',m\pm1}(j\pm m+1)(j\mp m)$$

通常取如下相位规定，即$\hat{j}_\pm$的矩阵元为实数，或$\hat{j}_x$的矩阵元为实数，而$\hat{j}_y$的矩阵元为纯虚数，即取

$$\langle jm\pm1|\hat{j}_x|jm\rangle=\frac{1}{2}\sqrt{(j\pm m+1)(j\mp m)},$$

$$\langle jm\pm1|\hat{j}_y|jm\rangle=-\frac{\mathrm{i}}{2}\sqrt{(j\pm m+1)(j\mp m)}.$$

特例，Pauli矩阵，在σ_z表象中，

$$\sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\sigma_y=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}.$$

（3）态叠加原理

在以$\hat{F}$的本征矢$|n\rangle$为基矢的表象中，$|n\rangle$的相位不定性$|\tilde{n}\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_n}|n\rangle$，表现在任意态$|\psi\rangle$的展开式中

$$|\psi\rangle=\sum_n|n\rangle\langle n|\psi\rangle=\sum_n|\tilde{n}\rangle\langle\tilde{n}|\psi\rangle,$$

尽管叠加系数不同

$$\langle\tilde{n}|\psi\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_n}\langle n|\psi\rangle,$$

但可观测量相同

$$|\langle\tilde{n}|\psi\rangle|^2=|\langle n|\psi\rangle|^2.$$

（4）Schrödinger方程

设$|\psi\rangle$满足Schrödinger方程，$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle=\hat{H}|\psi\rangle$，不难看出，在相位变换下$|\psi\rangle\to|\tilde{\psi}\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}|\psi\rangle$，$|\tilde{\psi}\rangle$同样也满足Schrödinger方程.

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}\rangle=\hat{H}|\tilde{\psi}\rangle.$$

[17] 曾谨言．量子力学　卷Ⅰ．北京：科学出版社，1990.

但这里未涉及初态条件的问题.由于 Schrödinger 方程只含波函数对 t 一次导数,只要一个体系的初态 $|\psi(0)\rangle$ 已经给定(包括相位),则以后任何时刻($t>0$)的量子态 $|\psi(t)\rangle$ 是完全确定的,不存在任何相位不定性.

但反过来思考一下,上述"相位不定性"概念还可以推广.如果不涉及量子态随时间演化问题(即不涉及是否满足 Schrödinger 方程),则相位不定性概念还可以推广为"含时相位不定性".这在 §1.1 讨论 Lewis 相时已经碰到了这个问题.

事实上,任何力学量 $\hat{F}$(含时,或不含时)的本征态都有含时相位不定性,只要 $\hat{F}(t)$ 不含对 t 微商之类的算符.例如体系的 Hamilton 量算符,

$$\hat{H}(t) = \hat{T}(\text{动能}) + \hat{V}(t),$$

$V(t)$ 代表外界含时作用.在此情况下,$\hat{F}(t)$ 本征方程为

$$\hat{F}(t)|n(t)\rangle = F_n(t)|n(t)\rangle$$

本征态 $|n(t)\rangle$ 作含时相变换,$|n(t)\rangle \rightarrow |\tilde{n}(t)\rangle = e^{i\alpha_n(t)}|n(t)\rangle$,($\alpha_n(t)$ 为实),则 $|\tilde{n}(t)\rangle$ 仍为 $\hat{F}(t)$ 本征态,归一化也能保持,

$$\hat{F}(t)|\tilde{n}(t)\rangle = F_n(t)|\tilde{n}(t)\rangle,$$

$$\langle\tilde{n}(t)|\tilde{n}(t)\rangle = 1.$$

从波函数的统计诠释来看,量子态 $|\psi\rangle$ 经含时相变换 $|\psi\rangle \rightarrow e^{i\alpha(t)}|\psi\rangle$,归一化以及任何力学量 $\hat{F}$ 的测量值及概率分布都保持不变.

如我们在教学中把这种含时相位不定性讲清楚了,则 Berry 绝热相,AA 相的出现就是很自然的事,一点不足为奇了.

2 带电粒子在磁场中的运动

大多数近代物理前沿领域都会涉及带电粒子在电磁场中运动这一量子力学问题.在这里,特别是涉及磁场中粒子的运动,还有很多问题人们了解得并不十分清楚.近几十年来在这方面的研究已取得可观的进展,但有待搞清的问题仍然不少.

均匀常磁场中带电粒子的能量本征值问题,Landau 已给出很漂亮的解(Landau 能级和波函数).但涉及 Landau 能级的 ∞ 度简并的根源以及与规范选取的关系,在一般量子力学教材中,并无清楚的说明.这将在 §2.1 中讨论.均匀常磁场 + 谐振子势中带电粒子的能量本征值问题,也可严格求解.这时,其能谱结构将出现新的特点(壳结构),这与体系的对称性的变化有什么关系? 这将在 §2.2 中讨论.反过来,这对于 Landau 能级的理解也许有帮助.彼此垂直的均匀常磁场和常电场中粒子能量本征值问题,也可以严格求解.此时,Landau 能级将展宽,形成 Landau 能带结构.这是理解量子 Hall 效应的理论基础.这将于 §2.3 中讨论.

均匀电场或均匀重力场(线性势)中粒子能级问题,以及 Coulomb 势中带电粒子的能级问题(氢原子),都已找到严格的解析题.遗憾的是,Coulomb 势 + 均匀常磁场中粒子的能量本征值问题,迄今并未找到解析解.处在通常实验室制备的磁场中的原子,磁场对电子的作用远小于原子核提供的 Coulomb 势的作用,因而可以用微扰论求解,通常分析 Zeeman 效应就是这样做的.但处于强磁场(例如白矮星或中子星中)的原子,电子所受到磁场的作用与 Coulomb 作用可相比拟.相应的 Schrödinger 方程的解析解,人们迄今尚未找到.这是天体物理和混沌理论中十分关注的问题.

在第一章中,已讨论了一些波函数相位的问题.涉及粒子在电

磁场中运动的量子力学问题，在20世纪50年代末 Aharonov-Bohm 效应提出后，曾经引起人们广泛的关注和反思. 在经典电动力学中，曾经引进矢势 $\boldsymbol{A}$ 和标势 φ 来作为计算电磁场强度 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的方便的工具. 但在带电粒子的基本动力学方程（Lorentz 力）中，只出现 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$，而并不出现 $\boldsymbol{A}$ 和 φ. 所以人们认为 $\boldsymbol{A}$ 和 φ 本身并无直接的物理意义. 在量子力学中则不然. 在采用正则形式的量子力学的基本动力学方程（Schrödinger 方程）中，在有电磁场的情况下，不可避免要出现矢势 $\boldsymbol{A}$ 和标势 φ. 在 Feynman 的路径积分形式中，计算带电粒子的传播子就涉及到 Lagrange 量中的 $\left(-q\varphi+\frac{q}{c}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}\right)$ 项. AB 效应向人们揭示了矢势 $\boldsymbol{A}$ 和标势 φ 的深刻的物理含义. 特别是在粒子所经历的空间区域中磁场强度为0的情况下，由于矢势 $\boldsymbol{A}$ 存在对于波函数相位的影响，会产生可观测的干涉现象. 这已为实验所证实，将在§2.6中介绍. 与此密切相关，人们当然会思考，在磁场强度 $\boldsymbol{B}=0$（但矢势 $\boldsymbol{A}\neq 0$）的空间中的带电粒子的能量本征值会不会受到影响？这将在§2.4中讨论. 这是 AB 效应在束缚态中的表现，涉及波函数的相位以及在多连通域中波函数的单值性问题. 所得出的结果是经典电动力学很难理解的，完全是一种量子力学效应. 与此密切相关的是超导环内磁通量子化和超导体的 Meissner 效应的关系，这将在§2.5中讨论. Aharonov 和 Bohm 不仅提到了矢势 $\boldsymbol{A}$，而且提到了标量 φ 与带电粒子作用所引起的相移也会产生可观测的效应（电 AB 效应）. 由于实验技术上的困难，至今尚未能观测到. 但中子（具有内禀磁矩）与外磁场的作用 $-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}$ 所产生的相移引起的干涉现象（标量 AB 效应），已在实验中观测到. 但其物理含义似与电 AB 效应不同. 这将于§2.7中介绍.

可以想象到，由于电磁场作用产生的波函数的相移，还会在很多新的、人们始未料及的现象中表现出来.

2.1 Landau 能级

2.1.1 Landau 能级的简并度

考虑均匀磁场 $\boldsymbol{B}$(沿 z 轴方向)中的电子(带电 $-e$,质量为 M).矢势取为 $\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}$,即,

$$A_x=-\frac{1}{2}By,A_y=\frac{1}{2}Bx,A_z=0,\tag{1}$$

则电子的 Hamilton 量为

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\frac{1}{2M}\left[\left(\hat{P}_x-\frac{eB}{2c}y\right)^2+\left(\hat{P}_y+\frac{eB}{2c}x\right)^2+\hat{P}_z^2\right]\\&=\frac{1}{2M}(\hat{P}_x^2+\hat{P}_y^2)+\frac{e^2B^2}{8Mc^2}(x^2+y^2)+\frac{eB}{2Mc}(x\hat{P}_y-y\hat{P}_x)+\frac{\hat{P}_z^2}{2M}.\end{aligned}\tag{2}$$

为便于讨论,以下把沿 z 轴方向的自由运动分离出去,撇开不管.电子在 xy 平面内(二维)运动的 Hamilton 量为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\omega_L\hat{l}_z,\tag{3}$$

$$\hat{H}_0=\frac{1}{2M}(\hat{P}_x^2+\hat{P}_y^2)+\frac{1}{2}M\omega_L^2(x^2+y^2),$$

$$\hat{l}_z=(x\hat{P}_y-y\hat{P}_x),$$

$$\omega_L=eB/2Mc(\text{Larmor 频率}),$$

式中 $B(\omega_L)$的线性项表示电子轨道运动磁矩与外磁场的作用.$B^2(\omega_L^2)$项为反磁项,对于通常实验室的磁场中的原子内的电子(Zeeman 效应),此项很小,常略去不计.但对于自由电子,或外磁场极强时(例如中子星内),B^2 项就很重要,必须考虑进去.此时,H_0 的形式与二维各向同性谐振子的 Hamilton 量相同,具有 SU_2 对称性.

此二维运动电子的守恒量完全集可取为$(\hat{H},\hat{l}_z)$或$(\hat{H}_0,\hat{l}_z)$，它们的共同本征函数(采用极坐标系)可表示为

$$\psi(\rho,\varphi)=\chi(\rho)e^{im\varphi},\ m=0,\pm 1,\pm 2,\cdots. \tag{4}$$

代入能量本征方程

$$\hat{H}\psi=E\psi \tag{5}$$

可得出径向波函数满足的方程

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}\right)+\frac{1}{2}M\omega_L^2\rho^2\right\}\chi(\rho)=(E-m\hbar\omega_L)\chi(\rho). \tag{6}$$

可解出能量本征值 E 为[1]

$$E=E_N=(N+1)\hbar\omega_L, \tag{7}$$

$$N=2n_\rho+|m|+m=0,2,4,\cdots$$

$$n_\rho=0,1,2,\cdots$$

相应的本征函数(未归一化)可表示为

$$\chi_{n_\rho m}(\rho)\sim\rho^{|m|}F(-n_\rho,|m|+1,\alpha^2\rho^2)e^{-\alpha^2\rho^2/2}, \tag{8}$$

$$\alpha=\sqrt{M\omega_L/\hbar}=\sqrt{eB/2\hbar c}$$

F 为合流超几何函数.

对于二维各向同性谐振子(自然频率为 ω_0)，能级为 $E_N=(N+1)\hbar\omega_0$，$N=2n_\rho+|m|=0,1,2,\cdots$，简并度为 $f_N=(N+1)$，(见§2.2).而对于均匀磁场 B 中的带电粒子，Hamilton 量(3)式中，由于出现了 $\omega_L\hat{l}_z$ 项，此时，尽管能量本征函数形式未变，能量本征值却变成为(7)式，式中 $N=2n_\rho+|m|+m$，容易看出，所有 $m\leqslant 0$ 的态所对应的能量本征值都相同，因而简并度变成∞.对于较低的几条能级的简并度分析，见表2.1.

[1] 参阅：曾谨言．量子力学　卷Ⅰ．北京：科学出版社，1990．302．

表 2.1 Landau 能级简并度的分析

N	$E_N/\hbar\omega_L$	n_ρ	m
0	1	0	0, -1, -2, -3, ⋯
2	3	0	1
		1	0, -1, -2, -3, ⋯
4	5	0	2
		1	1
		2	0, -1, -2, -3, ⋯
6	7	0	3
		1	2
		2	1
		3	0, -1, -2, -3, ⋯
⋮			

上述关于 Landau 能级简并度的结论，不因规范选择而异，例如，对于 Landau 采用过的规范[2]，

$$A_x = -By, A_y = A_z = 0, \tag{9}$$

与上面一样，当撇开 z 轴方向的自由运动后，在 xy 平面中运动的电子的 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\left[\left(\hat{P}_x - \frac{eB}{c}y\right)^2 + \hat{P}_y^2\right] \tag{10}$$

在此规范中，$[\hat{P}_x, \hat{H}] = 0$，守恒量完全集可取为$(\hat{H}, \hat{P}_x)$，它们的共同本征态可表成

$$\psi(x, y) = e^{iP_x x/\hbar}\chi(y), \tag{11}$$

式中动量的 x 方向分量本征值 P_x 为连续变化实数，$-\infty < P_x < +\infty$，$\chi(y)$满足下列方程

$$\frac{1}{2M}\left\{\left(P_x - \frac{eB}{c}y\right)^2 - \hbar^2\frac{d^2}{dy^2}\right\}\chi(y) = E\chi(y). \tag{12}$$

令 $cP_x/eB = y_0$，则上式化为

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\chi''(y) + \frac{1}{2}\omega_c^2(y - y_0)^2\chi(y) = E\chi(y), \tag{13}$$

$$\omega_c = eB/Mc = 2\omega_L, \tag{14}$$

---

[2] Landau L D, Lifshitz E M. Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory. 3rd. ed. New York: Pergamon Press, 1977. 456.

ω_c 称为 cyclotron 角频率[1].这是以 y_0 为平衡点的沿 y 方的简谐振动,能量本征值为

$$E = E_n = (n + 1/2)\hbar\omega_c = (2n + 1)\hbar\omega_L, n = 0,1,2,\cdots \tag{15}$$

与(7)式一致.相应的本征函数为

$$\chi_{ny_0}(y) \sim e^{-\alpha^2(y-y_0)^2/2}H_n(\alpha(y - y_0)). \tag{16}$$

能量本征值 E_n 与 y_0 无关,而 $y_0 = cP_x/eB$, $y_0(P_x)$ 可以取$(-\infty, +\infty)$中一切实数值,所以能级简并度也是∞.

2.1.2 简并度与守恒量的关系

量子体系的能级简并度与守恒量有密切关系.[3][4]

定理 设体系有两个不对易的守恒量 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$,即

$$[\hat{F},\hat{H}] = 0, [\hat{G},\hat{H}] = 0, 但[\hat{F},\hat{G}] = \hat{C} \neq 0,$$

〔注〕 对于在均匀磁场 B(沿 z 轴方向)中在 xy 平面内运动的经典电子,所受 Lorentz 力为 $\boldsymbol{F} = e\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}/c$, $\boldsymbol{v}$ 是电子速度.电子作圆周运动,半径为 R.维持圆周运动的向心力 Mv^2/R 由 Lorentz 力提供,即

$$Mv^2/R = evB/c$$

所以

$$R = Mvc/eB,$$

称为 cyclotron 半径.圆周运动的频率 $\nu = v/2\pi R$,而角频率 $\omega = 2\pi\nu = v/R$,所以

$$\omega = \omega_c = eB/Mc = 2\omega_L,$$

称为 cyclotron 角频率.

从量子力学来看,对于自然频率为 ω_0 的二维各向同性谐振子,基态波函数为(取自然单位)

$$\psi_0(\rho) \sim e^{-\rho^2/2}, \quad \rho^2 = x^2 + y^2.$$

粒子在$(\rho, \rho + d\rho)$中的概率为 $2\pi\rho e^{-\rho^2}d\rho$,其极值出现在 $\rho = a_0$ 处,

$$\frac{d}{d\rho}(\rho e^{-\rho^2})\bigg|_{\rho = a_0} = 0$$

容易求出 $a_0 = 1/\sqrt{2}$(自然单位).添上自然单位,$a_0 = \sqrt{\hbar/2M\omega_0}$.对于 $\omega_0 = \omega_L$,则 $a_0 = \sqrt{\hbar/M\omega_c} = \sqrt{\hbar c/eB}$,可以作为讨论 Landau 能级的长度自然单位.

〔3〕 曾谨言.量子力学.北京:科学出版社,1990~1991.卷Ⅰ.215;卷Ⅱ.248,§6.4

〔4〕 Fallieros S, Hadjimichael E. Am. J. Phys., 1995, 63: 1017.

则体系的能级不可能都不简并,即至少有一些能级是简并的.实际上可以说,体系能级一般是简并的,个别能级可能不简并.

证明

设 $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$.

利用$[\hat{F},\hat{H}]=0$,可知 $\hat{H}\hat{F}|\psi_n\rangle = \hat{F}\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n\hat{F}|\psi_n\rangle$,即$\hat{F}|\psi_n\rangle$仍为 $\hat{H}$ 本征态,相应本征值仍为 E_n.同样,$\hat{G}|\psi_n\rangle$也是 $\hat{H}$ 的本征态,本征值也是 E_n.

设$|\psi_n\rangle$不简并,则 $\hat{C}|\psi_n\rangle = (\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F})|\psi_n\rangle = (F_nG_n - G_nF_n)|\psi_n\rangle = 0$.

设$|\psi\rangle$为体系的任一量子态,它总可以用$|\psi_n\rangle$展开,

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n|\psi_n\rangle.$$

设所有$|\psi_n\rangle$都不简并,则

$$\hat{C}|\psi\rangle = \sum_n a_n\hat{C}|\psi_n\rangle = 0.$$

这与 $\hat{C}\neq 0$ 假设矛盾.所以,不可能所有能级都不简并.

推论 1 设$\hat{C}=c$(非零常数),则体系所有能级都简并,而且简并度为∞.

证明

设$|\psi_n\rangle$不简并,上面已证明 $\hat{C}|\psi_n\rangle=0$.但 $c|\psi_n\rangle\neq 0$,矛盾.所以不可能有不简并的能级.

设能级 E_n 为f_n 重简并,本征态记为$|\psi_{n\nu}\rangle$, $\nu=1,2,\cdots,f_n$.试在此 f_n 维子空间中求 $\hat{C}$ 的迹.

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(\hat{F}\hat{G}) &= \sum_{\nu=1}^{f_n}\langle\psi_{n\nu}|\hat{F}\hat{G}|\psi_{n\nu}\rangle \\ &= \sum_{\nu}\sum_{\mu=1}^{f_n}\langle\psi_{n\nu}|\hat{F}|\psi_{n\mu}\rangle\langle\psi_{n\mu}|\hat{G}|\psi_{n\nu}\rangle,\end{aligned}$$

$$\mathrm{tr}(\hat{G}\hat{F}) = \sum_{\nu}\sum_{\mu=1}^{f_n}\langle\psi_{n\nu}|\hat{G}|\psi_{n\mu}\rangle\langle\psi_{n\mu}|\hat{F}|\psi_{n\nu}\rangle.$$

它们都是两个矩阵的乘积求迹．设 f_n 有限，则求迹与矩阵相乘的次序无关，即 $\mathrm{tr}(\hat{F}\hat{G})=\mathrm{tr}(\hat{G}\hat{F})$，因而 $\mathrm{tr}\hat{C}=0$．但 $\mathrm{tr}\hat{C}=\sum_{\nu}\langle\psi_{n\nu}|\hat{C}|\psi_{n\nu}\rangle=c\sum_{\nu}\langle\psi_{n\nu}|\psi_{n\nu}\rangle=cf_n\neq0$，矛盾．所以 f_n 不能取有限值，即能级必为 ∞ 度简并．

推论 2 设守恒量 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 反对易，$\{\hat{F},\hat{G}\}=0$，因而 $\hat{C}=2\hat{F}\hat{G}=-2\hat{G}\hat{F}$．设 $|\psi_n\rangle$ 不简并，按以上讨论，$\hat{C}|\psi_n\rangle=0$．即 $\hat{F}\hat{G}|\psi_n\rangle=0$，$\hat{G}\hat{F}|\psi_n\rangle=0$．若 $|\psi_n\rangle$ 取为 $(\hat{H},\hat{F})$ 共同本征态，则 $\hat{G}\hat{F}|\psi_n\rangle=F_n\hat{G}|\psi_n\rangle=0$．如 $F_n\neq0$，$\hat{F}|\psi_n\rangle=F_n|\psi_n\rangle\neq0$，则 $\hat{G}|\psi_n\rangle=0$．同理，若取 $|\psi_n\rangle$ 为 $(\hat{H},\hat{G})$ 的共同本征态，则 $\hat{F}\hat{G}|\psi_n\rangle=G_n\hat{F}|\psi_n\rangle=0$．如 $G_n\neq0$，即 $\hat{G}|\psi_n\rangle=G_n|\psi_n\rangle\neq0$，则 $\hat{F}|\psi_n\rangle=0$．综合起来，$|\psi_n\rangle$ 在 $\hat{F}$ 或 $\hat{G}$ 运算下，$\hat{F}|\psi_n\rangle=0$ 或 $\hat{G}|\psi_n\rangle=0$，二者至少有一个成立．

简单举例．

例 1 中心力场 $V(r)$ 中的粒子，角动量 $\hat{l}_x,\hat{l}_y,\hat{l}_z$ 均为守恒量．能量本征态一般取为 $(\hat{H},\hat{l}^2,\hat{l}_z)$ 的共同本征态，$|\psi_{n_rlm}\rangle$，相应能级 E_{n_rl} 为 $(2l+1)$ 重简并．即能级一般是简并的，除 $l=0$ 态外．对于 $l=0$ 能级 E_{n_r0}，只对应一个本征态 $|\psi_{n_r00}\rangle$，是不简并的．由于 $\hat{C}=[\hat{l}_x,\hat{l}_y]=\mathrm{i}\hbar\hat{l}_z$，必有 $\hat{l}_z|\psi_{n_r00}\rangle=0$．事实上，$\hat{l}_x|\psi_{n_r00}\rangle=\hat{l}_y|\psi_{n_r00}\rangle=0$ 也成立．

例 2 二维自由粒子，动量 $\hat{P}_x$ 和 $\hat{P}_y$ 均为守恒量，而 $[\hat{P}_x,\hat{P}_y]=0$，所以能级为 ∞ 度简并．

现在来讨论 Landau 能级简并度为 ∞ 的问题．

在均匀常磁场 B 中的带电 q 的粒子，经典 Hamilton 量为

$$\hat{H}=\frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2M}=\frac{1}{2M}\left(\boldsymbol{P}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 \tag{17}$$

式中 $\boldsymbol{\pi}=\boldsymbol{P}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}$ 是机械动量，$\boldsymbol{P}$ 为正则动量，$\boldsymbol{A}$ 为矢势，$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$．在经典力学中，容易证明

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{\pi} = \frac{q}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}, 或 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\boldsymbol{\pi} - \frac{q}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}\right) = 0, \tag{18}$$

$\frac{q}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}$ 为 Lorentz 力. $\boldsymbol{\pi} - \frac{q}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}$ 为守恒量. 设 $\boldsymbol{B}$ 沿 z 方向,则

$$\frac{qB}{c}y - \pi_x = \frac{qB}{c}\left(y - \frac{c}{qB}\pi_x\right) = 常量,$$

$$+\frac{qB}{c}x + \pi_y = \frac{qB}{c}\left(x + \frac{c}{qB}\pi_y\right) = 常量.$$

因此可以定义一个垂直于 $\boldsymbol{B}$ 的守恒量 $\boldsymbol{R}$,

$$\begin{aligned} R_x &= x + \frac{c}{qB}\pi_y, \\ R_y &= y - \frac{c}{qB}\pi_x. \end{aligned} \tag{19}$$

容易看出,

$$(x - R_x)^2 + (y - R_y)^2 = \frac{c^2}{q^2B^2}(\pi_x^2 + \pi_y^2) = \frac{2Mc^2}{q^2B^2}\hat{H}, \tag{20}$$

式中已把与问题无关的 z 方向运动略去. 粒子在 xy 平面中的运动为一个圆. 圆心在 (R_x, R_y) 点,半径由粒子能量(机械动量)确定. 以 (R_x, R_y) 为参照点,机械角动量为

$$\Lambda_z = (x - R_x)\pi_y - (y - R_y)\pi_x = -\frac{2Mc}{qB}\hat{H}, \tag{21}$$

$\hat{H} = -\frac{qB}{2Mc}\Lambda_z$, H 和 Λ_z 是等价的守恒量.

当过渡到量子力学时,可定义相应的算符. 在坐标表象中,

$$\begin{aligned} &\hat{x} = x, \hat{y} = y \\ &\hat{P}_x = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \hat{P}_y = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \\ &\hat{\pi}_x = \hat{P}_x - \frac{q}{c}A_x, \hat{\pi}_y = \hat{P}_y - \frac{q}{c}A_y, \\ &\hat{R}_x = x + \frac{c}{qB}\hat{\pi}_y, \hat{R}_y = y - \frac{c}{qB}\hat{\pi}_x. \end{aligned} \tag{22}$$

可以证明,无论取什么规范,下列对易式都成立[注],

$$[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y] = \mathrm{i}\hbar\frac{q}{c}B, \tag{23}$$

$$[\hat{R}_x,\hat{R}_y] = -\mathrm{i}\hbar c/qB, \tag{24}$$

$$[\hat{H},\hat{R}_x] = 0,[\hat{H},\hat{R}_y] = 0, \tag{25}$$

$$[\hat{H},\hat{\pi}_x] \neq 0,[\hat{H},\hat{\pi}_y] \neq 0. \tag{26}$$

即存在两个守恒量 $\hat{R}_x$ 和 $\hat{R}_y$，而$[\hat{R}_x,\hat{R}_y]$ = 不为 0 的常量. 按前述定理的推论 1，能级简并度为∞.

2.1.3 Landau 能级的单位面积简并度

先讨论 Landau 规范. 设电子限制在有限空间中运动，例如局限于 xy 平面内的一个矩形 $L_x\times L_y$ 中（L_x 和 L_y 代表边长）. 为保证 $\hat{P}_x = -\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ 为厄米算符，波函数必须满足周期性边条件（箱归一化法则），P_x 取值受如下限制

$$P_xL_x/\hbar = 2k\pi,\ k = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\cdots \tag{27}$$

即 $P_x = kh/L_x$，P_x 取值每间隔 h/L_x 就出现一个可能值. 而 $y_0 = cP_x/eB$，P_x 的可能取值与 y_0 可能取值有关，因而影响到能级的简并度. 由于 y 方向的运动限制在箱内 $\Delta y_0 = L_y$，因而 P_x 变化范围是 $\Delta P_x = \dfrac{eB}{c}\Delta y_0 = \dfrac{eB}{c}L_y$. 在此范围中 P_x 可能取值的个数，即能级简并度 f 为

$$f = \Delta P_x\Big/\left(\frac{h}{L_x}\right) = \frac{eB}{hc}S \tag{28}$$

〔注〕 例如，规范 $A_x = -\dfrac{1}{2}By, A_y = \dfrac{1}{2}Bx, A_z = 0$

$$\hat{\pi}_x = \hat{P}_x + \frac{qB}{2c}y = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x} + \frac{qB}{2c}y,$$

$$\hat{\pi}_y = \hat{P}_y - \frac{qB}{2c}x = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial y} - \frac{qB}{2c}x,$$

$$\hat{R}_x = x + \frac{c}{qB}\hat{\pi}_y = \frac{x}{2} + \frac{c}{qB}\hat{P}_y,$$

$$\hat{R}_y = y - \frac{c}{qB}\hat{\pi}_x = \frac{y}{2} - \frac{c}{qB}\hat{P}_x,$$

Landau 规范 $A_x = -By, A_y = 0, A_z = 0$

$$\hat{\pi}_x = \hat{P}_x + \frac{qB}{c}y = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x} + \frac{qB}{c}y,$$

$$\hat{\pi}_y = \hat{P}_y = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial y},$$

$$\hat{R}_x = x + \frac{c}{qB}\hat{\pi}_y = x + \frac{c}{qB}\hat{P}_y,$$

$$\hat{R}_y = y - \frac{c}{qB}\hat{\pi}_x = -\frac{c}{qB}\hat{P}_x.$$

$S = L_x L_y$ 是箱面积．对于完全自由的电子，$S \to \infty$，能级简并度为 ∞．对于限制在有限空间中运动的电子，简并度随 S 增大而增大，而单位面积的简并度

$$g = f/S = eB/hc \tag{29}$$

g 与磁场强度成正比．

如采用均匀磁场的规范(1)，则用极坐标系讨论较为方便．本征函数如式(4)和(8)所示，能量本征值为(见(7)式)

$$E = (2n_\rho + |m| + m + 1)\hbar\omega_L, \omega_L = eB/2Mc \tag{30}$$

Hamilton 量可写成(见(6)式)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{m^2\hbar^2}{2M\rho^2} + \frac{e^2B^2}{8Mc^2}\rho^2 + \frac{m\hbar eB}{2Mc} \tag{31}$$

利用 Hellmann-Feynman 定理，把 B 视为参数，则有$\left\langle\frac{\partial\hat{H}}{\partial B}\right\rangle = \partial E/\partial B$，即

$$\frac{e^2B}{4Mc^2}\langle\rho^2\rangle + \frac{me\hbar}{2Mc} = (2n_\rho + |m| + m + 1)\frac{e\hbar}{2Mc}$$

所以

$$\langle\rho^2\rangle = (2n_\rho + |m| + 1)\frac{2\hbar c}{eB} \tag{32}$$

$\langle\rho^2\rangle$依赖于$(2n_\rho + |m| + 1)$以及磁场强度 B．当$|m|$很大时，

$$\sqrt{\langle\rho^2\rangle} \approx \sqrt{2\hbar c|m|/eB}. \tag{33}$$

如电子限制在半径为 R 的圆内运动，R 为一个宏观量，$\langle\rho^2\rangle \sim R^2$，相应的$|m|$也很大，

$$|m| \leqslant \frac{eB}{2\hbar c}R^2 = \frac{eB}{hc}S, (S = \pi R^2) \tag{34}$$

这也就是说，能级简并度 $f \sim \frac{eB}{hc}S$，而单位面积的简并度为 $g = f/S \sim eB/hc$．

还可以看出，通过电子封闭轨道(用 n_ρ, m 刻划)面积 S 的磁通为

$$\Phi = BS = |m|\left(\frac{hc}{e}\right) = |m|\Phi_0 \tag{35}$$

是量子化的.随$|m|$增大,R 和 $S=\pi R^2$ 随之增大,磁通量也增大.当然,在宏观极限,$|m|\gg1$,这种量子化效应的表现就不易被觉察.

如把 Hamilton 量(31)中的磁量子数 m 视为参数,利用 Hellmann-Feynman 定理,$\langle\partial\hat{H}/\partial m\rangle=\partial E/\partial m$,

$$\langle\frac{\partial\hat{H}}{\partial m}\rangle = \frac{m\hbar^2}{M}\langle\frac{1}{\rho^2}\rangle + \frac{\hbar eB}{2Mc}$$

对于 $m\geqslant0$ 情况,(利用(30)式)

$$\frac{\partial E}{\partial m} = \frac{e\hbar}{Mc}B,$$

由此可得出

$$\langle\frac{1}{\rho^2}\rangle = \frac{eB}{2m\hbar c}. \tag{36}$$

对于 $m<0$ 情况,$E=(2n_\rho+1)e\hbar B/2Mc$,不依赖于 m,$\partial E/\partial m=0$,则有

$$\frac{m\hbar^2}{M}\langle\frac{1}{\rho^2}\rangle = -\frac{\hbar eB}{2Mc} \tag{37}$$

因此

$$\langle\frac{1}{\rho^2}\rangle = \frac{eB}{2\hbar c}\frac{1}{|m|} \qquad (m\geqslant0 \text{ 或 } m<0) \tag{38}$$

在大量子数极限下(见(32)式,n_ρ 给定,$m\gg1$)

$$\langle\rho^2\rangle = (2n_\rho+|m|+1)\frac{2\hbar c}{eB} \approx |m|\frac{2\hbar c}{eB} \tag{39}$$

可以看出

$$\langle\rho^2\rangle = 1\Big/\langle\frac{1}{\rho^2}\rangle \tag{40}$$

这正是经典轨道运动图象所期望的.

2.1.4 Landau 能级的代数解法[5]

电子在垂直于均匀磁场方向的平面中的运动,Hamilton 量如(3)式所示.其本征值的求解,可采用类似于一维谐振子代数解法的技巧.引进无量纲变量

$$z = (x + \mathrm{i}y)/2a_0, \quad z^* = (x - \mathrm{i}y)/2a_0, \tag{41}$$

$a_0 = \sqrt{\hbar c/eB}$是均匀磁场 B 中电子运动的自然长度.上式之逆为

$$x = a_0(z^* + z), y = \mathrm{i}a_0(z^* - z) \tag{42}$$

则式(3)可化为[注]

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hbar\omega_L\left(zz^* + z\frac{\partial}{\partial z} + z^*\frac{\partial}{\partial z^*} - \frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial z^*}\right)\\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega_c\left\{\left(z - \frac{\partial}{\partial z^*}\right)\left(z^* + \frac{\partial}{\partial z}\right) + 1\right\}\end{aligned} \tag{43}$$

令算符

$$a = \left(z^* + \frac{\partial}{\partial z}\right)\bigg/\sqrt{2}, \quad a^\dagger = \left(z - \frac{\partial}{\partial z^*}\right)\bigg/\sqrt{2} \tag{44}$$

不难证明

$$[a, a^\dagger] = 1. \tag{45}$$

(43)式可化为

---

[5] 参阅葛墨林,王育竹.大学物理中的前沿问题.兰州:兰州大学出版社,1987.61.

[注] 利用(42)式,容易得出

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{1}{a_0^2}\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial z^*},$$

$$x^2 + y^2 = 4a_0^2 zz^*,$$

$$\hat{l}_z = -\mathrm{i}\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \hbar\left(z^*\frac{\partial}{\partial z^*} - z\frac{\partial}{\partial z}\right).$$

$$\hat{H} = \hbar\omega_c(a^{\dagger}a + 1/2) \tag{46}$$

所以能量本征值为

$$\begin{aligned} E &= (n + 1/2)\hbar\omega_c, \quad n = 0,1,2,\cdots \\ &= (N + 1)\hbar\omega_L, \quad N = 2n = 0,2,4,\cdots \end{aligned} \tag{47}$$

与(7)式和(15)式相同.

关于能级简并度,一定涉及存在另外的守恒量.仔细分析表明,除了算符 $a, a^{\dagger}$ 之外,还存在算符

$$b = \left(z + \frac{\partial}{\partial z^*}\right)\Big/\sqrt{2}, \quad b^{\dagger} = \left(z^* - \frac{\partial}{\partial z}\right)\Big/\sqrt{2} \tag{48}$$

$$[b, b^{+}] = 1 \tag{49}$$

而且 $a, a^{\dagger}$ 与 $b, b^{\dagger}$ 对易,

$$[b, a] = 0, [b, a^{\dagger}] = 0, [b^{\dagger}, a] = 0, [b^{+}, a^{\dagger}] = 0 \tag{50}$$

因此,厄米算符 $b^{\dagger}b$ 与 $\hat{H}$ 对易,即为守恒量.为了把 $\hat{H}$ 的诸简并态标记清楚,不妨把 $\hat{H}$ 的本征态选为守恒量完全集 $\hat{H}$(或 $a^{\dagger}a$)与 $b^{\dagger}b$ 的共同本征态,记为 $\psi_{n\nu}$,

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_{n\nu} &= \hbar\omega_c(n + 1/2)\psi_{n\nu}, n = 0,1,2,\cdots \\ b^{\dagger}b\psi_{n\nu} &= \nu\psi_{n\nu}, \nu = 0,1,2,\cdots \end{aligned} \tag{51}$$

即用 n 标记能量本征值,而用 $b^{\dagger}b$ 的本征值 ν 来区分诸简并态.

设最低能级($n = 0$)的本征态之一记为 ψ_0,满足 $a\psi_0 = 0$.在坐标表象中,即

$$\left(z^* + \frac{\partial}{\partial z}\right)\psi_0(z) = 0. \tag{52}$$

解之,得

$$\psi_0(z) \sim e^{-zz^*}. \tag{53}$$

其它本征态一般形式可表示为 $b^{\dagger\nu}a^{\dagger n}\psi_0$,即

$$\psi_{n\nu}(z) \sim \left(z^* - \frac{\partial}{\partial z}\right)^{\nu}\left(z - \frac{\partial}{\partial z^*}\right)^{n} e^{-zz^*}. \tag{54}$$

特别是 $n=0$ 能级各简并态可表示为

$$\psi_{0\nu}(z) \sim \left(z^* - \frac{\partial}{\partial z}\right)^\nu e^{-z^* z}. \tag{55}$$

利用

$$\left(z^* - \frac{\partial}{\partial z}\right) e^{-z^* z} = 2z^* e^{-z^* z}$$

$$\left(z^* - \frac{\partial}{\partial z}\right)^2 e^{-z^* z} = 4z^{*2} e^{-z^* z}$$

……

$$\left(z^* - \frac{\partial}{\partial z}\right)^\nu e^{-z^* z} = 2^\nu z^{*\nu} e^{-z^* z}$$

所以

$$\psi_{0\nu}(z) \sim z^{*\nu} e^{-z^* z} \tag{56}$$

ν 的上界即 E_0 能级的简并度. 考虑到 $\rho^2 = x^2 + y^2 = 4a_0^2 z^* z$，在 $\psi_{0\nu}(z)$态下，ρ^2 的平均值为

$$\langle \rho^2 \rangle = 2a_0^2(\nu + 1). \tag{57}$$

设电子限制在半径为 R 的圆内，$\langle \rho^2 \rangle \leqslant R^2$，则有

$$2\pi a_0^2(\nu + 1) \leqslant S, \ (S = \pi R^2) \tag{58}$$

所以

$$\nu < S/2\pi a_0^2 = \frac{S}{2\pi} \frac{eB}{\hbar c} = S \frac{eB}{hc}. \tag{59}$$

因此简并度为

$$f = \frac{eB}{hc} S. \tag{60}$$

对于完全自由的电子，$S \to \infty$，$f \to \infty$. 单位面积简并度为 $g = f/S = eB/hc$，与磁场强度成正比.

2.2 各向同性带电谐振子在均匀磁场中的能谱壳结构

考虑二维各向同性谐振子势

$$V = \frac{1}{2} M\omega_0^2(x^2 + y^2) \tag{1}$$

中的电子(带电 $-e$),受到沿 z 轴方向的均匀常磁场 $\boldsymbol{B}$ 的作用.矢势取为 $\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}$,则 Hamilton 量表为(参阅 § 2.1,(3)式)

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2) + \frac{1}{2} M\omega^2(x^2 + y^2) + \omega_L \hat{l}_z, \tag{2}$$

式中

$$\omega^2 = \omega_0^2 + \omega_L^2, \tag{3}$$

$$\omega_L = eB/2Mc. \tag{4}$$

能量本征值为

$$E = (2n_\rho + |m| + 1)\hbar\omega + m\hbar\omega_L \tag{5}$$

$$n_\rho = 0,1,2,\cdots$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2,\cdots$$

如 $B = 0$,则化为二维各向同性谐振子谱,

$$E = (2n_\rho + |m| + 1)\hbar\omega_0 = (n + 1)\hbar\omega_0 \tag{6}$$

$$n = 2n_\rho + |m| = 0,1,2,\cdots$$

其简并度为 $f_n = (n+1)$,是 SU_2 对称性的反映.

如 $B \to \infty$,即 $\omega_L \gg \omega_0, \omega \approx \omega_L$,则化为自由电子在均匀磁场中的能谱,即 Landau 能级,

$$\begin{aligned} E &= (2n_\rho + |m| + m + 1)\hbar\omega_L \\ &= (N+1)\hbar\omega_L, N = 2n_\rho + |m| + m = 0,2,4,\cdots \end{aligned} \tag{7}$$

$$= (n + 1/2)\hbar\omega_c, n = n_\rho + (|m| + m)/2 = 0,1,2,\cdots$$

$\omega_c = 2\omega_L$，简并度为∞.

在一般情况($B \neq 0$)下，能级简并全部解除.但我们有趣地注意到，在磁场强度合适的情况下，使得

$$\omega_L/\omega = a/b, \tag{8}$$

a/b 为简单分数(a, b 既约)，则能级会出现新的简并和新的壳结构.以下先具体讨论两个特殊情况.一般情况下的能级壳层结构随磁场强度的变化，见图2.1.

(a) $\omega_L/\omega = 1/3$

$$E = (2n_\rho + |m| + 1)\hbar\omega + \frac{1}{3}m\hbar\omega \tag{9}$$

$$= \hbar\omega(N + 3)/3,$$

$$N = 6n_\rho + (|m| + m) + 2|m| = 0,2,4,\cdots$$

能级简并度为

$$f_N = \left[\frac{1}{2}\left(\frac{N}{2} + 1\right)\right] = 1,1;2,2;3,3;\cdots \tag{10}$$

$[x]$表示不比 x 小的最小整数.最低10条能级的各简并态的标记，见表2.2(a).

(b) $\omega_L/\omega = 1/2$

$$E = (2n_\rho + |m| + 1)\hbar\omega + \frac{1}{2}m\hbar\omega \tag{11}$$

$$= \hbar\omega(N + 2)/2,$$

$$N = 4n_\rho + (|m| + m) + |m| = 0,1,2,\cdots$$

能级简并度为

$$f_N = \left[\frac{1}{3}(N + 1)\right] = 1,1,1;2,2,2;3,3,3;\cdots \tag{12}$$

最低的12条能级的简并度的标记，见表2.2(b).

表 2.2 二维各向同性谐振子场＋均匀磁场中电子的能级壳结构.

谐振子场 $V=\frac{1}{2}M\omega_0^2(x^2+y^2)$，$\omega=\sqrt{\omega_0^2+\omega_1^2}$，$\omega_L=eB/2Mc$.

(a) $\omega_L/\omega=1/3$ 情况（见(9)式）

N	$E_N/\hbar\omega$	n_ρ	m	f_N	幻数
0	1	0	0	1	2
2	5/3	0	−1	1	4
4	7/3	0	−2	2	8
		0	1		
6	3	0	−3	2	12
		1	0		
8	11/3	0	−4	3	18
		0	2		
		1	−1		
10	13/3	0	−5	3	24
		1	−2		
		1	1		
12	5	0	−6	4	32
		0	3		
		1	−3		
		2	0		
14	17/3	0	−7	4	40
		1	−4		
		1	2		
		2	−1		
16	19/3	0	−8	5	50
		0	4		
		1	−5		
		2	−2		
		2	1		
18	7	0	−9	5	60
		1	−6		
		1	3		
		2	−3		
		3	0		

(b) $\omega_1/\omega=1/2$ 情况（见(11)式）

N	$E_N/\hbar\omega$	n_ρ	m	f_N	幻数
0	1	0	0	1	2
1	3/2	0	−1	1	4
2	2	0	−2	1	6
3	5/2	0	−3	2	10
		0	1		
4	3	0	−4	2	14
		1	0		
5	7/2	0	−5	2	18
		1	−1		
6	4	0	−6	3	24
		0	2		
		1	−2		
7	9/2	0	−7	3	30
		1	−3		
		1	1		
8	5	0	−8	3	36
		1	−4		
		2	0		
9	11/2	0	−9	4	44
		0	3		
		1	−5		
		2	−1		
10	6	0	−10	4	52
		1	−6		
		1	2		
		2	−2		
11	13/2	0	−11	4	60
		1	−7		
		2	−3		
		2	1		

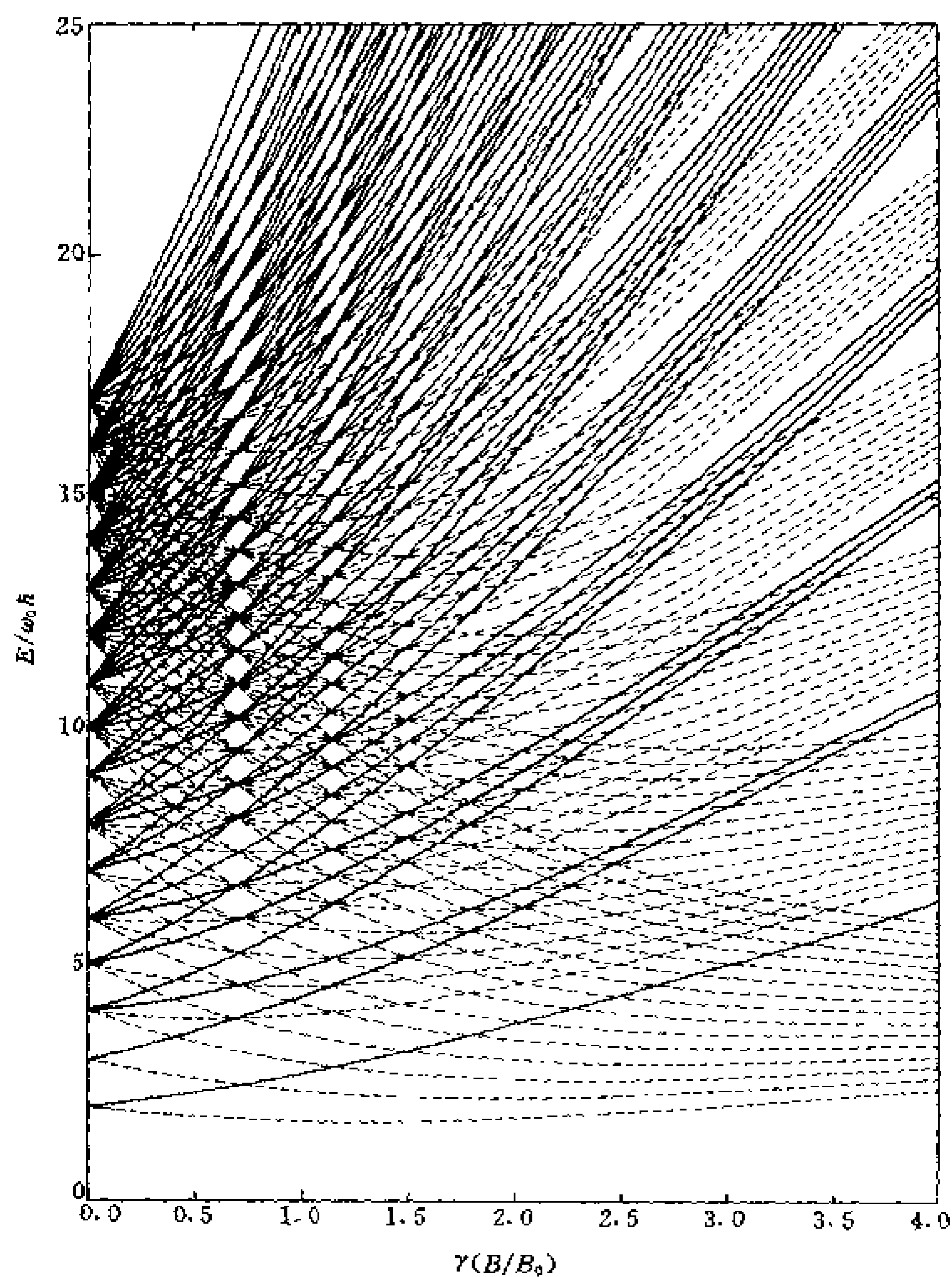


图 2.1 均匀磁场中各向同性带电谐振子的能级壳结构

2.3 互相垂直的均匀常磁场和电场中粒子的运动，Landau 能带

设电场 $\boldsymbol{E}$ 沿 y 方向，磁场 $\boldsymbol{B}$ 沿 z 方向．选择 Landau 规范(见§2.1,(9)式)，$\boldsymbol{A}=(-By,0,0)$，则带电 q 的粒子的 Hamilton 量为

$$\hat{H}=\frac{1}{2M}\left[\left(\hat{P}_x+\frac{qB}{c}y\right)^2+\hat{P}_y^2+\hat{P}_z^2\right]-qEy. \tag{1}$$

从经典力学来看，由于粒子受力在 xy 平面内，如粒子初速方向在 xy 平面内，则粒子将限制在 xy 平面内运动．从量子力学本征值问题来看，不妨把沿 z 轴方向的自由运动分离出去．于是问题就化为二维粒子运动．此时

$$\hat{H}=\frac{1}{2M}\left[\left(\hat{P}_x+\frac{qB}{c}y\right)^2+\hat{P}_y^2\right]-qEy. \tag{2}$$

考虑到，$[\hat{P}_x,\hat{H}]=0$(注意，$[\hat{P}_y,\hat{H}]\neq 0$)，能量本征态可取为守恒量完全集$(\hat{H},\hat{P}_x)$的共同本征态，即

$$\psi(x,y)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}P_x x/\hbar}\varphi(y), \tag{3}$$
$$-\infty<P_x(实)<+\infty,$$

$\varphi(y)$满足

$$\left\{\frac{1}{2M}\left[\left(P_x+\frac{qB}{c}y\right)^2+\hat{P}_y^2\right]-qEy\right\}\varphi(y)=\varepsilon\varphi(y), \tag{4}$$

ε 为能量本征值．上式可化为 y 方向的谐振子的能量本征方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{q^2B^2}{2Mc^2}(y-y_0)^2\right]\varphi(y)=\left[\varepsilon-\frac{1}{2M}P_x^2+\frac{q^2B^2}{2Mc^2}y_0^2\right]\varphi(y),$$

$$y_0=\frac{Mc^2}{q^2B^2}\left(\frac{qB}{Mc}P_x+qE\right). \tag{5}$$

y_0 是谐振子势的平衡点，依赖于 P_x，E 和 B 的值．能量本征值为

$$\varepsilon_{nP_x}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c+\frac{1}{2M}P_x^2-\frac{q^2B^2}{2Mc^2}y_0^2$$
$$=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c-\frac{cEP_x}{B}-\frac{Mc^2E^2}{2B^2}, \tag{6}$$

$$n = 0, 1, 2, \cdots,$$
$$\omega_c = |q| B/Mc.$$

在不加电场($E=0$)时,能级还原为 Landau 能级.如在 x 方向的运动不受到另外的限制,P_x 可以取($-\infty$, $+\infty$)中一切实数值,因而 y_0 也可以取($-\infty$, $+\infty$)中一切实数值.所以每一条 Landau 能级都是∞度简并.

当电场存在($E\neq 0$)时,能级 ε_{nP_x} 依赖于 n 和 P_x,能级简并解除.如在 x 方向的运动不受另外的限制,$-\infty < P_x < +\infty$,P_x 可连续变化,则每一条 Landau 能级都将展宽为一条连续变化的能带.但如在 x 方向的运动受到限制,则 P_x 取值将受到限制,能级的简并度也变为有限.例如,假设粒子限制在 xy 平面内的面积 S 中运动,则 Landau 能级简并度为 $f = \frac{|q|B}{hc}S$.此时,当加上 x 方向电场 E 时,每一条 Landau 能级都分裂成 f 条分立的能级,构成一条能带,称为 Landau 能带.能带所包含的分立能级的数目为

$$f = \frac{|q|BS}{hc} = \Phi/\Phi_0,$$

$\Phi = BS$ 为穿过 xy 平面内面积 S 的磁通量,$\Phi_0 = hc/|q|$ 为磁通量子.所以 Landau 能带所含能级数目即通过面积 S 的磁通量子的数目.

Landau 能级是均匀分布的(相邻能级是等间距的).在加上垂直方向均匀电场后,形成等间距分布的一系列能带.相邻能带的间隙中,还可能存在丰富的电子束缚态能级,在这种能级上的电子不参与导电.Landau 能带概念是理解整数量子 Hall 效应[6]的理论基础[7].有关介绍可参阅文献[5](葛墨林,王育邠.大学物理中的前沿问题.p.46~58).

---

[6] Klitzing K V, Dorda G, Pepper M. Phys. Rev. Lett., 1980, **45**: 494.

[7] Laughlin R B. Phys. Rev., 1981, **B23**: 5632.

2.4 圆环上带电粒子的能谱与磁通

2.4.1 无磁通情况

考虑质量为 M 带电 q 的粒子，限制在半径为 R 的环上运动. 采用极坐标(原点取在环心)，Hamilton 量表示为

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}_{\varphi}^{2}}{2M}=\frac{\hat{L}_{z}^{2}}{2MR^{2}}=-\frac{\hbar^{2}}{2MR^{2}}\frac{\partial^{2}}{\partial\varphi^{2}}. \tag{1}$$

其本征态可以取为守恒量 $\hat{L}_z=R\hat{p}_{\varphi}=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$的本征态，

$$\psi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\mathrm{i}m\varphi}, \tag{2}$$

相应的 $\hat{L}_z$ 本征值为 $m\hbar$. 为保证 $\hat{L}_z$ 的厄米性 $\hat{L}_z^{+}=\hat{L}_z$，要求 $\psi(\varphi)$满足周期性边条件[8](或称单值条件)，

$$\psi(\varphi+2\pi)=\psi(\varphi), \tag{3}$$

则要求

$$m=0,\pm1,\pm2,\cdots. \tag{4}$$

此边条件导致粒子的角动量以及能量本征值量子化，能量本征值为

$$E=E_m=\frac{m^2\hbar^2}{2MR^2}. \tag{5}$$

除 $m=0$ 外，能级是二重简并.

2.4.2 有磁通情况

设有一条无限长的细螺线管穿过环心，磁场 B 限制在管内，磁通为 Φ. 在管外无磁场($B=0$)，但有矢势 $\boldsymbol{A}$.(习惯上称为

[8] 例如，参阅：曾谨言. 量子力学 卷 I. 北京：科学出版社，1990. 161.

Aharonov-Bohm 型磁通管).从经典电动力学来看,在环上运动的带电粒子不受到 Lorentz 力,粒子的能量不会受到磁通存在的影响.但从量子力学来看,矢势 $\boldsymbol{A}$ 出现在 Schrödinger 方程中,能量本征值一般要受到磁通的影响.在严格求解 Schrödinger 方程之前,下面先用 Bohr 量子化条件来讨论一下粒子能谱的变化.

在本题中,矢势 $\boldsymbol{A}$ 可以简单取为

$$A_\varphi = \Phi/2\pi\rho,\ A_\rho = 0,\ A_z = 0. \tag{6}$$

可以看出,$\rho=0$ 点为 $\boldsymbol{A}$ 的奇点.不难验证[注],除 $\rho=0$ 点外,$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A} = 0$.

对于在环上运动的粒子,机械动量为 Mv,正则动量为 $Mv + qA_\varphi/c$,正则角动量为 $(Mv + qA_\varphi/c)R$.按照 Bohr 正则量子化条件,$(Mv + qA_\varphi/c)R = m\hbar$, $m=0, \pm 1, \pm 2,\cdots$.因此,$MvR = m\hbar - qA_\varphi R/c = \hbar(m - q\Phi/2\pi\hbar c)$,能量 $E = \frac{1}{2}Mv^2 = (MvR)^2/2MR^2$ 为

$$E = \frac{\hbar^2}{2MR^2}\left(m - \frac{q\Phi}{hc}\right)^2,\ m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots. \tag{7}$$

可以看出,粒子能量本征值 E 依赖于磁通 Φ 的值,它与无磁通情况下的能谱显然不同,尽管在有磁通情况下环上粒子所在地域的磁场 $\boldsymbol{B}=0$.这完全是一种量子效应.

〔注〕 矢势沿绕螺管的半径为 ρ 的圆 C 的线积分,显然为 $\oint_C \boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{l} = 2\pi\rho A_\varphi$.而按 Stokes 定理,$\oint_C \boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{l} = \iint_S (\nabla\times\boldsymbol{A})\cdot d\boldsymbol{s} = \iint_S \boldsymbol{B}\cdot d\boldsymbol{s} = \Phi$.所以 $A_\varphi = \Phi/2\pi\rho$.在柱坐标系中,

$$(\nabla\times\boldsymbol{A})_\rho = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}A_z - \frac{\partial}{\partial z}A_\varphi = 0,$$

$$(\nabla\times\boldsymbol{A})_\varphi = \frac{\partial}{\partial z}A_\rho - \frac{\partial}{\partial\rho}A_z = 0,$$

$$(\nabla\times\boldsymbol{A})_z = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}(\rho A_\varphi) - \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}A_\rho = 0,\ (\rho=0\ 除外).$$

现在来考虑有磁通情况下的能量本征方程. 此时粒子的 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\left[-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{q\boldsymbol{A}}{c}\right]^2$$

$$= \frac{1}{2MR^2}\left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{qA_\varphi R}{c}\right]^2$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2MR^2}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\mathrm{i}q\Phi}{2\pi\hbar c}\right)^2. \tag{8}$$

能量本征方程为

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2MR^2}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\mathrm{i}q\Phi}{2\pi\hbar c}\right)^2\psi = E\psi. \tag{9}$$

试作规范变换[注], 令

$$\psi(\varphi) = \psi'(\varphi)\mathrm{e}^{\mathrm{i}q\chi(\varphi)/\hbar c},\quad \chi(\varphi) = \frac{1}{2\pi}\Phi\varphi, \tag{10}$$

$$= \psi'(\varphi)\mathrm{e}^{\mathrm{i}q\Phi\varphi/2\pi\hbar c}.$$

代入(9)式, 可得

$$-\frac{\hbar^2}{2MR^2}\frac{\partial^2}{\partial\psi^2}\psi' = E\psi', \tag{11}$$

方程中磁通 Φ 已消失. ψ' 解可表示为 $\psi'(\varphi) \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}m'\varphi}$, 相应的能量为 $m'^2\hbar^2/2MR^2$, 而

$$\psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m'\varphi + \mathrm{i}q\Phi\varphi/hc} \tag{12}$$

$\psi(\varphi)$要求满足周期性边条件(或称单值条件)

$$\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi), \tag{13}$$

由此可得

$$(m' + q\Phi/hc) = m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots. \tag{14}$$

[注]这相应于矢势 $\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} - \nabla\chi$. 即 $A'_\varphi = A_\varphi - \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}\chi = \frac{\Phi}{2\pi\rho} - \frac{1}{\rho}\cdot\frac{\Phi}{2\pi} = 0$.
注意: $\chi(\varphi) = \Phi\varphi/(2\pi)$是不单值的.

因此，能量本征值为

$$E = \frac{m'^2\hbar^2}{2MR^2} = \frac{\hbar^2}{2MR^2}\left(m - \frac{q\Phi}{hc}\right)^2, \tag{15}$$

相应的能量本征函数为

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\left(m' + \frac{q\Phi}{hc}\right)\varphi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, \tag{16}$$

满足周期性边条件，与无磁通情况下相同．但能谱(15)与无磁通情况(见(5)式)不同(见图 2.2)，它依赖于环内的磁通的值，尽管在环上运动的带电粒子并不感受到磁场 B 的 Lorentz 力(从经典电动

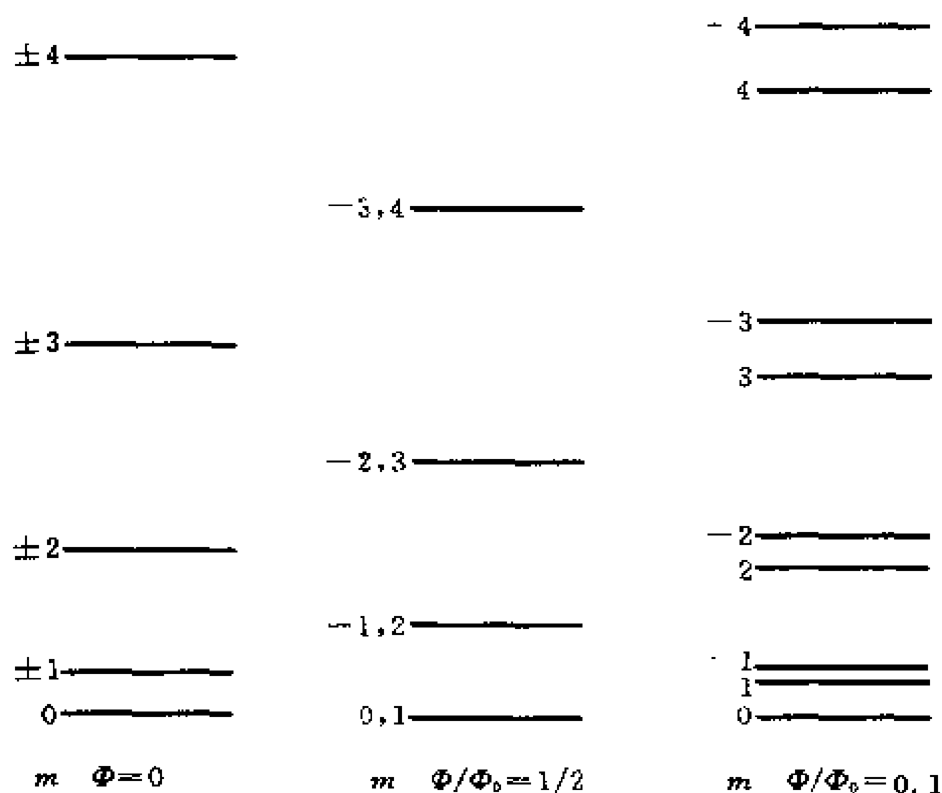


图 2.2 带电平面转子能谱 $(E_m - E_0)\Big/\left(\frac{\hbar^2}{2MR^2}\right)$，$\Phi_0 = hc/q$

力学观点来看)．特别是能级的简并度．在 $\Phi = 0$ 情况，除基态外，各能级为二重简并．而当 Φ/Φ_0 = 半奇数($\Phi_0 = hc/q$)，所有能级都是二重简并．当 Φ/Φ_0 = 整数(超导环)情况，能谱与无磁通情况相

同.在一般情况下,$\Phi/\Phi_0 \neq$ 整数或半奇数,所有能级都变得不简并.能谱的变化会导致能级间 γ 跃迁谱线的变化,这应该是可以观测的.对此,Merzbacher[9] 提到:

"We refer to this nonclassical effect as the Aharonov-Bohm[10] effect, which provides the example that, though $B=0$ in the circular track, the nonvanishing of the vector potential A gives rise to a physical effect".

这完全是一种量子效应.尽管粒子所在地域的(local)磁场 $B=0$、粒子的束缚定态能级却发生了变化.这是由于 Schrödinger 方程中出现了矢势 $\boldsymbol{A}$,表现为波函数中出现一个与矢势(的路径积分)有关的相因子,因而通过波函数的单值条件而影响到定态能级.这是AB 效应[10](见§2.6)在束缚态中的表现.最初,AB 效应是讨论通过两条路径(中间包围有磁通)的带电粒子的波函数的相位差而产生的干涉现象,涉及的是散射态.

一般说来,带电 q 的粒子在磁场中运动的 Hamilton 量为(见本章末,附录1)

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\left(\hat{\boldsymbol{P}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2, \hat{\boldsymbol{P}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla \tag{17}$$

A 为电磁场矢势.能量本征方程表示为

$$\frac{1}{2M}\left(\hat{\boldsymbol{P}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}). \tag{18}$$

则不妨作一个相位变换[11],令

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \psi'(\boldsymbol{r})e^{\mathrm{i}S(\boldsymbol{r})/\hbar}, \tag{19}$$

式中 $e^{\mathrm{i}S(\boldsymbol{r})/\hbar}$ 称为 Dirac 相因子,$S(\boldsymbol{r})$满足

$$\nabla S(\boldsymbol{r}) = \frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) \tag{20}$$

---

[9] Merzbacher E. *Single valuedness of wave function*. Am. J. Phys., 1926, **30**: 237.

[10] Aharonov Y, Bohm D. *Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory*. Phys. Rev., 1959, **115**: 485.

[11] Berry M V. Proc. Roy Soc. (London), 1984, **A392**: 45.

或

$$S(\boldsymbol{r}) = \frac{q}{c}\int^{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}' + \text{常量}, \tag{21}$$

用(21)式代入(18)式,不难求出

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\psi'(\boldsymbol{r}) = E\psi'(\boldsymbol{r}). \tag{22}$$

矢势已在方程中消失.具体用到本题中,$A_\varphi = \dfrac{\Phi}{2\pi\rho}$,$\int^{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}' = \int^{\varphi} A_\varphi \cdot \rho \mathrm{d}\varphi = \Phi\varphi/2\pi$,$\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}q\Phi\varphi/2\pi\hbar c}$,(19)式化为

$$\psi(\varphi) \sim \psi'(\varphi)\mathrm{e}^{\mathrm{i}q\Phi\varphi/2\pi\hbar c}, \tag{23}$$

即(10)式.问题重要的是要求 $\psi(\varphi)$(而不是$\psi'(\varphi)$)满足周期性边条件.事实上,$\psi'(\varphi)$和 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}q\Phi\varphi/2\pi c}$分别都不满足周期性条件.Byers 和 Yang[12] 特别指出:"ψ'并不简单地与 ψ成比例".

* * *

附注.含时 **Schrödinger 方程的规范变换**

注 1 带电 q 的粒子在矢势 $\boldsymbol{A}$ 和标势 φ 中的含时 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{P}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + q\varphi\right]\psi, \hat{\boldsymbol{P}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla \tag{24}$$

作规范变换,令

$$\psi = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qf/\hbar c}\psi', \tag{25}$$

不难证明[13]

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi' = \left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{P}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}'\right)^2 + q\varphi'\right]\psi', \hat{\boldsymbol{P}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla \tag{26}$$

式中

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}' &= \boldsymbol{A} + \nabla f(\boldsymbol{r},t) \\ \varphi' &= \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}f(\boldsymbol{r},t) \end{aligned} \tag{27}$$

---

[12] Byers N, Yang C N. Phys. Rev. Lett., 1961, 7:46.

[13] 参阅:曾谨言.量子力学 卷Ⅰ.北京:科学出版社,1990,323.

$f(\boldsymbol{r},t)$为非奇异函数.

注 2 在只有常磁场的情况,可取 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}),\varphi=0$(与 t 无关),则

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{P}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi. \tag{28}$$

令

$$\psi=\mathrm{e}^{\mathrm{i}qf/\hbar c}\psi' \tag{29}$$

则

$$\begin{aligned}&\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'=\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{P}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}'\right)^2\psi'\\&\boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}+\nabla f(\boldsymbol{r}),\varphi'=0.\end{aligned} \tag{30}$$

设想 f 取得合适,使$\nabla f=-\boldsymbol{A}$,则 $A'=0$,即矢势在 Schrödinger 方程中消失,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'=\frac{1}{2m}\hat{P}^2\psi'. \tag{31}$$

换言之,若要矢势从 Schrödinger 方程(21)中消失,只须作如下变换,

$$\psi=\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}\psi', \tag{32}$$

式中 $S=-qf/c,\nabla S=-q\nabla f/c=q\boldsymbol{A}/c$,即

$$S(\boldsymbol{r})=\frac{q}{c}\int^{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}'. \tag{33}$$

或者说,与无矢势下的波函数 ψ' 相比,在有矢势 $\boldsymbol{A}$ 的情况下,波函数 $\psi=\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}\psi'$,多出了一个相因子,称为 Dirac 相因子

$$\exp\left[\frac{\mathrm{i}q}{\hbar c}\int^{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\right] \tag{34}$$

注 3 设只有电场,可取 $\varphi=\varphi(t),\boldsymbol{A}=0$. Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left[\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{P}}^2+q\varphi\right]\psi, \tag{35}$$

令

$$\psi=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qf/\hbar c}\psi'$$

要求

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi' = \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{P}}^2\psi',$$

即要求 $\boldsymbol{A}'=0, \varphi'=0$. 这相当于变换$\frac{\partial f}{\partial t}=c\varphi(t)$. 所以, 要求标势 $\varphi(t)$从 Schrödinger 中消失, 只须作如下变换,

$$\begin{aligned} \psi &= e^{iS/\hbar}\psi', \\ S(t) &= -\int^t q\varphi(t')dt'. \end{aligned} \tag{36}$$

更一般情况[10], 设

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = [\hat{H}_0 + V(t)]\psi, \tag{37}$$

令 $\psi = \psi' e^{iS/\hbar}, S = -\int^t V(t')dt'$, 则

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi' = \hat{H}_0\psi' \tag{38}$$

方程中标势 $V(t)$就消失了. 换言之, 与无标势下的波函数 ψ' 相比, 波函数 $\psi = e^{iS/\hbar}\psi'$ 中多出一个相因子

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int^t V(t')dt'\right] \tag{39}$$

注 4 经典电动力学中, 带电 q 的粒子在电磁场中的 Lagrange 量为

$$L = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{v} - q\varphi. \tag{40}$$

按 Feynman 的路径积分, 传播子 $\propto e^{iS/\hbar}$, 式中 $S = \int L dt$, L 中的 $\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{v}$项贡献相因子为

$$\exp\left[\frac{q}{c}\int^t \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{v}dt\right] = \exp\left[\frac{q}{c}\int^{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{r}\right], \tag{41}$$

$-q\varphi$ 项贡献相因子为

$$\exp\left[-q\int^t \varphi dt\right]. \tag{42}$$

2.5 超导环内磁通量子化与 Meissner 效应

实验证明[14],通过一个超导环的磁通量是量子化的,即磁通量 Φ 为

$$\Phi = n\Phi_0, \Phi_0 = hc/2e, n \text{ 为整数}. \tag{1}$$

此现象曾经为 London 预言过[15]、Byers 和 Yang[12]对此作了更深刻的理论分析.在分析中深入讨论了波函数的周期性(单值)边条件以及有磁通和无磁通情况下波函数的差异.

物理量的量子化现象是量子力学区别于经典力学的一个主要特征,它和 Planck 常数 h 紧密联系在一起.众所周知的角动量量子化问题,早在 Bohr 和 Sommerfeld 的早期量子论中已提出.后来在 de Broglie 的物质波假说中从波动的相位相干性对此作了一个物理上的诠释.在波动力学中,又从角动量算符的厄米性和波函数的周期性边条件,对角动量量子化作了更严格的理论解释.应该说,磁通量子化与角动量量子化在理论基础上有相似之处,但正如 Byers 和 Yang 指出的那样,这里有一个新的情况,即超导环内的磁通量子化是与 Meissner 效应[16]密切相关的,而除此之外,它并未包含什么新的物理原理.但磁通量子化证实了超导体内电子配对的现象($q = -2e$).

下面简单介绍 Byers 和 Yang 的理论分析[12],供初学者参阅.

考虑图 2.3 所示超导环(双连通超导体).按照 Meissner 效应,超导体内部(P)区域中磁场 $B=0$,电流为 0,但在其表层,有电流存在,由此而产生的磁场与外磁源产生的磁场在超导体内部互相抵消,但在环内产生一个磁通 Φ.

---

[14] Deaver B S, Jr. Fairbank W M. Phys. Rev. Lett., 1961, 7: 43.

[15] London F. *Superfluids*. New York: John-Wiley & Sons, Inc. 1950. 152.

[16] Meissner W, Ochsenfeld R. Naturwiss, 1933, 21: 787.

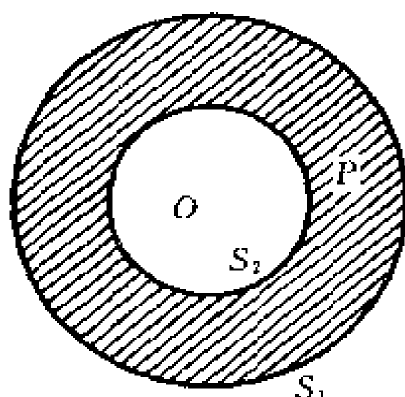


图 2.3

在超导体内部，电子的能量本征方程(即定态波函数满足的方程)为

$$\sum_j \frac{1}{2m}\left[-i\hbar\nabla_j + \frac{e}{c}A(r_j)\right]^2\psi + V\psi = E\psi \tag{2}$$

A 为超导体表层电流和外磁源贡献的矢势．求解时，要求 ψ满足单值性(周期性)条件．考虑到超导体内部 $B=\nabla\times A=0$，可以令 $A=\nabla\chi$．但在 P(双连通)域内 χ是非单值的．例如，绕 O 一圈后 χ 增加

$$\delta\chi = \oint A\cdot dl = \iint B\cdot ds = \Phi. \tag{3}$$

令

$$\psi = \psi'\exp\left[-\frac{ie}{\hbar c}\sum_j \chi(r_j)\right], \tag{4}$$

代入(2)式，得

$$\sum_j \frac{1}{2M}(-i\hbar\nabla_j)^2\psi' + V\psi' = E\psi', \tag{5}$$

式中矢势 A 不再出现．但注意，ψ'不再满足单值条件．例如，当这些电子中之一 r_l 绕 O 一周后(其它电子位置不动)，考虑到式(3)和(4)，ψ'变化如下，

$$\psi' \to \psi' e^{i\frac{e}{\hbar c}\Phi} = \psi' e^{i\pi\Phi/\Phi_0}, \tag{6}$$

$$\Phi_0 = hc/2e.$$

在无磁通($\Phi=0$)情况下,$\psi'(\Phi=0)=\psi$ 是单值的,当电子绕 O 一周后,波函数还原.但在有磁通的情况下,ψ' 并不简单地与 $\psi=\psi'(\Phi=0)$ 成比例,ψ' 并不单值.

在边条件(6)下求解方程(5),可求出电子的能量本征值 E.在形状规则和适当条件下(例如,$V=0$,S_1 和 S_2 为同轴圆轴面的情况,在 S_1 和 S_2 面上 $\psi=0$),可以找到方程的解析解.在一般情况下,尽管具体求解有困难,但可以判断:

(1) 能量 E 是 Φ 的周期函数,周期为 $2\Phi_0=hc/e$.因为在方程(5)中不出现 Φ,而从(6)式可知,当 $\Phi\to\Phi+n2\Phi_0$ 时,ψ' 不变.所以 E 不变.

(2) 如 $V^*=V$,从方程(5)取复共轭可以证明,E 是 Φ 的偶函数($\Phi\to-\Phi$,E 不改变).若计及电子自旋,则要求 V 在时间反演下不变.

根据上述结论,可以得出,体系的配分函数 Q(依赖于 E)也是 Φ 的周期函数(周期为 hc/e)和偶函数(图 2.4).由此可得出,当 $\Phi=(hc/e)\times$ 半奇数 $=(hc/2e)\times$ 整数时,

$$\frac{\partial}{\partial\Phi}\ln Q=0. \tag{7}$$

另一方面,超导体内绕 O 点的体电流为[12]

$$I=kTc\,\frac{\partial}{\partial\Phi}\ln Q\Big|_T \tag{8}$$

c 为光速,k 为 Boltzmann 常数.按 Meissner 效应,要求 $I=0$,即要求 $\partial\ln Q/\partial\Phi=0$,即对于体系的稳定态,要求 $\ln Q$(作为 Φ 的函数),取

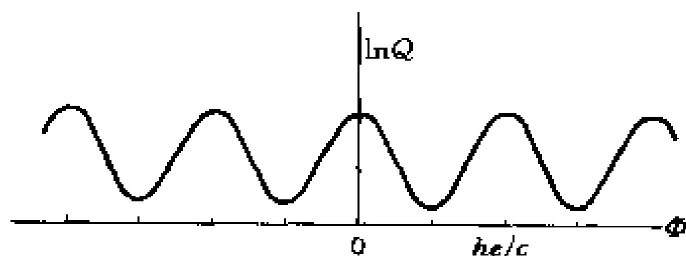


图 2.4 取自 Byers 和 Yang[12] 一文.

极大和极小值.结合(7)式成立条件,即要求磁通量子化,$\Phi = n\Phi_0$, $\Phi_0 = hc/2e$.

2.6 Aharonov-Bohm 效应

在经典电动力学中,标量势和矢量势,原来只是作为描述电磁场的一个方便的数学工具而引进的.诚然,在经典力学的正则形式中,对于带电粒子的描述,的确要出现标势和矢势.但在带电粒子运动的基本方程中

$$m\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{v} = \left(q\boldsymbol{E} + \frac{q}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}\right), \tag{1}$$

却只出现粒子所在地域的(local)的电场强度 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$和磁场强度 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)$.

与此不同,在量子力学中(无论是 Schrödinger 的波动力学,Heisenberg 的矩阵力学,或 Feynman 的路径积分),对于带电粒子的描述,都会出现矢势和标势.例如带电粒子的基本方程——Schrödinger 方程中,就不可避免出现矢势和标势.Aharonov-Bohm[7] 首先注意到电磁矢势和标势的深刻的物理含义.他们指出:在电磁场强度为零的空间中(但矢势和标势并不为零)运动的两束相干的带电粒子,其波函数有可能出现不同的相位变化.因此,把两束粒子重新会聚后,会出现可以观测的干涉现象.不久,在实验上的确观测到了这种现象[17].人们称之为 AB 效应[18].Furry 和 Ramsey[19] 还从量子力学理论本身的自洽性来论证了 AB 效应的正确性.下面分别讨论两种形式的 AB 效应.

---

[17] Chambers R G. Phys. Rev. Lett., 1960, 5: 3.

[18] 例如,参阅:Peskin M, Tonomura A. *The Aharonov-Bohm effect*, Lecture Notes in Physics, Vol. **340**. Berlin: Springer-Verlag, 1989.

[19] Furry W H, Ramsey N F. Phys. Rev., 1960, **118**: 623.

2.6.1 磁 AB 效应

如示意图 2.5 所示，相干电子束在 A 点经过两条缝分裂成两束，分别经过空间两条路径 P_1 和 P_2，然后在 D 点重新会聚．设在

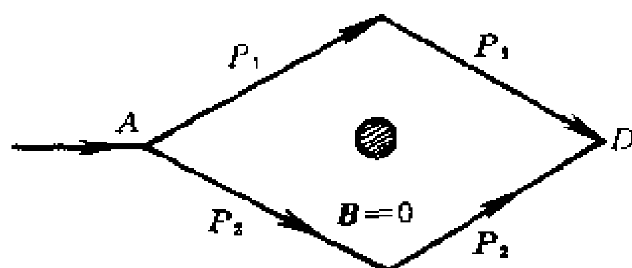


图 2.5 磁 AB 效应示意图

无磁场情况下，波函数表述为

$$\psi(\boldsymbol{r},t) \sim \psi_1(\boldsymbol{r},t) + \psi_2(\boldsymbol{r},t). \tag{2}$$

现在在缝后两条路径之间放在一个细长螺管（垂直纸面向外），管内有磁场 $\boldsymbol{B}$，磁通为 Φ．在螺管外，磁场强度 $\boldsymbol{B}=0$，特别是在两束电子经过的路径上 $\boldsymbol{B}=0$（但 $\boldsymbol{A}\neq 0$）．此时，电子波函数中会出现一个 Dirac 相因子（$q=-e$）

$$\begin{aligned}
\psi(\boldsymbol{r},t) &\sim \psi_1(\boldsymbol{r},t)\exp\left[-\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\int_{P_1}^{r}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}\right] + \psi_2(\boldsymbol{r},t) \\
&\quad \times\exp\left[-\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\int_{P_2}^{r}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}\right] \\
&\propto \psi_1(\boldsymbol{r},t) + \psi_2(\boldsymbol{r},t)\exp\left[-\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\left(\int_{P_2} - \int_{P_1}\right)\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}\right] \\
&= \psi_1(\boldsymbol{r},t) + \psi_2(\boldsymbol{r},t)\exp\left[-\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\oint_C\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}\right] \\
&= \psi_1(\boldsymbol{r},t) + \psi_2(\boldsymbol{r},t)\exp\left(-\frac{\mathrm{i}e\Phi}{\hbar c}\right),
\end{aligned} \tag{3}$$

式中 $\Phi=\oint_C\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\iint_S(\nabla\times\boldsymbol{A})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}=\iint_S\boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 是通过螺管的磁通．因此，在有磁场的情况下，通过两条路径的电子波函数

有一个相位差

$$\delta\phi = e\Phi/\hbar c. \tag{4}$$

随磁场强度 B(即 Φ)的变化,相差 $\delta\phi$ 也发生变化,干涉花纹也随之而变.周期为 $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/e = hc/e$.这已在实验中观测到($hc/e$ oscillation,或称 AB oscillation).

2.6.2 电 AB 效应

设想入射电子束被分为两束(图 2.6),分别经过路径 P_1 和 P_2.在路径上分别放置 Faraday 筒(空心圆柱金属筒,起屏蔽作用,筒内无电场).两个筒的静电势分别为 φ_2 和 φ_1,电势差 $\Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1$.设电子经历 Faraday 筒所需时间为 τ,则经历两条路径的电子的波函数之间将出现一个相差,

$$\delta\phi = \frac{e\tau}{\hbar}\Delta\varphi. \tag{5}$$

由于技术上的困难,这种电 AB 效应尚未在实验上观测到.

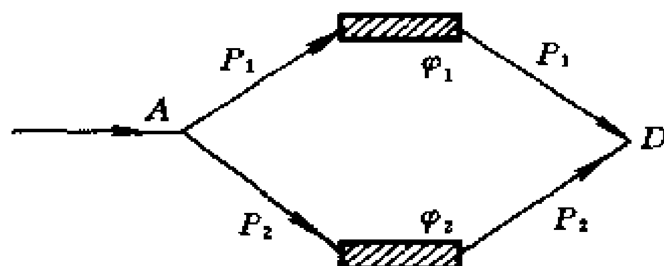


图 2.6 电 AB 效应示意图

2.7 标量 AB 效应

最近,Allman 等人[20]利用中子干涉仪进行了类似于电子的电 AB 效应的实验.中子不带电($q=0$),但具有内禀磁矩 μ.在外磁场

---

[20] Allman R F et al. Phys. Rev. Lett., 1992, 68: 2409.

$\boldsymbol{B}$ 中,将感受到一项相互作用能 $V=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$,($\boldsymbol{\sigma}$ 为 Pauli 算子),形式上与电子和标势 φ 的相互作用 $V=-e\varphi$ 有相似之处.中子 Hamilton 量表示为

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2-\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B},\quad \hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\nabla \tag{1}$$

如图 2.7,入射的相干中子束(波包)被分裂成两束,分别经历两条路径后,在 D 点重新叠加.在路径上分别放置有螺线管.在两个螺线管中除通有恒定电流外,在第 2 螺线管中还加上脉冲电流,产生脉冲磁场 $\boldsymbol{B}(t)$,每次持续时间 τ.中子束经过此螺线管内部时,将感受到此脉冲磁场的作用.因此,经历两条路径的中子波函数之间有一个相对相差.设磁场方向为 z 方向,中子沿磁场方向极化($\sigma_z=1$),则此相差为

$$\delta\phi=\frac{\mu B}{\hbar}\tau. \tag{2}$$

实验上已观测到此相差引起的干涉现象,被称为标量 AB 效应(scaler AB effect).

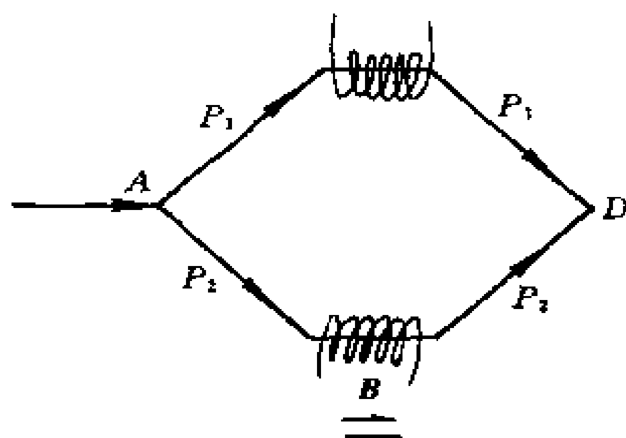


图 2.7 标量 AB 效应示意图

但正如 Peshkin 和 Lipkin[21]指出,这种标量 AB 效应与电 AB 效应有本质上差异.首先表现在,AB 效应是非局域的(nonlocal).

[21] Peshkin M, Lipkin H J. Phys. Rev. Lett., 1995, 74: 2847.

在磁或电 AB 效应中电子并未感受到磁场或电场的作用力，电子与电磁场之间没有动量、能量和角动量的交换，并且其 Hamilton 量、可观测量的运动方程和对易关系中，都不涉及电子所在地域的(local)当时的(contemporaneous)电磁场强度．而在标量AB效应中，则涉及中子所在地域当时的磁场强度．其次表现在，AB 效应是一种具有拓扑性质的效应(topological effect)，要求电子在一个多连通域中运动．对于空间某一特定点，或者干涉仪中的某一臂，并无一个客观的相移与之对应．两个 Feynman 概率幅之间的相对相移只依赖于它们之间的拓扑绕圈数(topological winding number) n 之差，

$$\delta\phi = \frac{e\Phi}{\hbar c}\delta n. \tag{3}$$

(对于干涉仪，两臂的绕圈数差 $\delta n = 1$)．$\delta\phi$ 依赖于磁通 Φ 这个物理量，$\Phi = \oint \boldsymbol{A}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}$，其被积函数 $\boldsymbol{A}$ 并非规范不变量，唯一的规范不变量是 Φ，它是 $\boldsymbol{A}$ 绕一个闭合围道的积分．此效应明显是非局域的，因为 $\delta\phi$ 依赖于在此积分域之外的物理量 Φ．此效应是拓扑性的含义是指它只依赖于闭合围道相对于它所包围的磁通的拓扑性质．

下面以 AB 效应和标量 AB 效应对比，作更具体的分析．首先，在 AB 效应中，电子的 Hamilton 量

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{P}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - e\varphi, \quad \hat{\boldsymbol{P}} = -\mathrm{i}\hbar\,\nabla, \tag{4}$$

包含有规范场矢势 $\boldsymbol{A}$ 和标势 φ，它们在电子位置 $\boldsymbol{r}$ 处并不为 0，但磁场强度 $\boldsymbol{B}$ 和电场强度 $\boldsymbol{E}$ 为 0．对于 AB 效应，可以忽略电子的自旋自由度，而可观测量的运动方程为

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{r}} &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},\hat{H}] = \frac{1}{m}\left(\hat{\boldsymbol{P}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right) = \hat{\boldsymbol{v}},\\ m\dot{\hat{\boldsymbol{v}}} &= \frac{m}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{\boldsymbol{v}},\hat{H}] = 0,\text{(机械动量守恒)}.\end{aligned} \tag{5}$$

与自由粒子相同，式中不含磁场和电场强度．这是可以理解的．因

为电子所在地域当时的 $\boldsymbol{B}=0$, Lorentz 力为 0,电子与电磁场无动量、能量交换.但注意,正如文献[19]中指出:"In quantum mechanics, the equation of motion alone do not determine the dynamics". AB 效应中的干涉仪的两臂的电子波函数之间还可能出现相对相差(这与空间的非单连通性有关).

对于标量 AB 效应,Hamilton 量(1)式中就含有中子所在地域当时的磁场强度 $\boldsymbol{B}$(规范不变),但不含 $\boldsymbol{A}$.假设 $\boldsymbol{B}$ 为空间均匀,利用$[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}]=-2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{B}$,不难证明,

$$\dot{\boldsymbol{s}}=\frac{\hbar}{2}\dot{\boldsymbol{\sigma}}=\mu\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{B}. \tag{6}$$

此运动方程中同样含有中子所在地域当时的磁场强度 $\boldsymbol{B}$.这与 AB 效应中的运动方程明显不同.(6)式右边 $\boldsymbol{L}=\mu\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{B}$ 是作用于中子(磁矩)的局域的当时的力矩,使中子产生进动.以下设 $\boldsymbol{B}$ 沿 z 轴方向,$\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$,则(6)式化为

$$\dot{\sigma}_x=\omega\sigma_y,\quad \dot{\sigma}_y=-\omega\sigma_x,\quad \dot{\sigma}_z=0, \tag{7}$$

$\omega=2\mu B/\hbar$ 即 Larmor 进动角频率.定义自旋自动关联算符(spin autocorrelation operator),用以描述 $\sigma_x(t)$ 与 $\sigma_y(t)$的关联,

$$\begin{aligned} C(t)&=\frac{1}{4}[\sigma_x(0)\sigma_x(t)+\sigma_y(0)\sigma_y(t)+\text{厄米共轭项}],\\ S(t)&=\frac{1}{4}[\sigma_x(0)\sigma_y(t)-\sigma_y(0)\sigma_x(t)+\text{厄米共轭项}]. \end{aligned} \tag{8}$$

显然 $C(0)=1$, $S(0)=0$.不难证明(利用(7)式)

$$\dot{C}(t)=\omega S(t),\dot{S}(t)=-\omega C(t). \tag{9}$$

所以

$$C(t)=\cos\omega t,\quad S(t)=-\sin\omega t. \tag{10}$$

它们都以角频率 ω 随时间演化.这不能用经典图像来理解,但可以用半经典的矢量模型来描述,即中子自旋 $\boldsymbol{\sigma}(t)$(或磁矩 $\boldsymbol{\mu}(t)=\mu\boldsymbol{\sigma}(t)$)绕 z 轴(磁场方向)在一圆锥面上运动,$\langle\sigma_x(t)\rangle=\langle\sigma_y(t)\rangle=0$.正象一个对称陀螺,其角动量绕磁场方向进动一样,进动角频

率与旋转轴和磁场方向的夹角无关，这就是自旋自动关联 $C(t)$和 $S(t)$与自旋态无关的原因.

中子干涉仪(图 2.7)的两臂上的中子分波在 D 点重新会聚时，自旋关联角 $\theta(t)=\omega t$ 为(见(3)式)

$$\theta(\tau) = \omega\tau = 2\delta\phi. \tag{11}$$

因子 2 正是自旋为 1/2 的波函数在转动下出现的.

如单独讨论 $\sigma_x(t),\sigma_y(t),\sigma_z(t)$，则它们的平均值与自旋态有关.为讨论方便，令 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{n}$，$\boldsymbol{n}=\boldsymbol{B}/B$ 为磁场方向单位矢，因此 $\hat{H}=\hat{P}^2/2m-\mu B\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$，利用$[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}]=-2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{n}$，可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{\sigma},H] = \omega\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{n} \tag{12}$$

$$\omega = 2\mu B/\hbar$$

此式与(6)式是一致的.

设 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{B}/B$ 方向固定，(12)×$\boldsymbol{n}$ 得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{n} &= \omega(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{n})\times\boldsymbol{n}\\ &= \omega[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}-\boldsymbol{\sigma}].\end{aligned} \tag{13}$$

注意，$\sigma_n=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 为守恒量，$\dot{\sigma}_n=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\sigma_n,H]=0$，再利用(12)式和(13)式，可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}-\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{n})] = \mathrm{i}\omega[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}-\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{n})]. \tag{14}$$

因此

$$[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}-\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{n})]_t = [(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}-\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{n})]_{t=0}e^{\mathrm{i}\omega t}. \tag{15}$$

取平均值，

$$\begin{aligned}&\langle\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\rangle_t\boldsymbol{n}-\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t+\mathrm{i}\langle\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{n}\rangle_t\\ &= [\langle\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\rangle_0\boldsymbol{n}-\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_0+\mathrm{i}\langle\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{n}\rangle_0](\cos\omega t+\mathrm{i}\sin\omega t).\end{aligned} \tag{16}$$

分别取实部和虚部，注意$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})$为守恒量$\langle\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\rangle_t=\langle\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\rangle_0$，得

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_t = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_0 \cos\omega t + (1 - \cos\omega t)\langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} \rangle_0 \boldsymbol{n} + \langle \boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{n} \rangle_0 \sin\omega t,$$
$$\langle \boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{n} \rangle_t = \langle \boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{n} \rangle_0 \cos\omega t - [\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_0 - (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n})_0 \boldsymbol{n}]\sin\omega t. \tag{17}$$

设入射中子已极化，$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_0 = \boldsymbol{e}_3$（沿 z 轴），记 $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2, n_3)$，则 $\langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} \rangle_0 = n_3$，$\langle \boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{n} \rangle_0 = \boldsymbol{e}_3 \times \boldsymbol{n} = n_1 \boldsymbol{e}_2 - n_2 \boldsymbol{e}_1$，代入(17)式，得

$$\begin{aligned} \langle \sigma_x \rangle_t &= n_1 n_3 (1 - \cos\omega t) - n_2 \sin\omega t, \\ \langle \sigma_y \rangle_t &= n_2 n_3 (1 - \cos\omega t) - n_1 \sin\omega t, \\ \langle \sigma_z \rangle_t &= n_3^2 + (1 - n_3^2)\cos\omega t. \end{aligned} \tag{18}$$

它们都以角频率 ω 变化. 如 $\boldsymbol{B}$ 沿 z 轴方向（与中子极化方向相同），$\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_3$，即 $n_1 = n_2 = 0, n_3 = 1$，则

$$\langle \sigma_x \rangle_t = 0, \langle \sigma_y \rangle_t = 0, \langle \sigma_z \rangle_t = 1. \tag{19}$$

以上结果也可直接求解含时 Schrödinger 方程得到[22].

附录 1　规范不变性

A1.1　经典电动力学中的规范不变性

电磁场矢势 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$ 与标势 $\varphi(\boldsymbol{r}, t)$ 在如下变换下

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) &\to \boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) + \nabla f(\boldsymbol{r}, t), \\ \varphi(\boldsymbol{r}, t) &\to \varphi'(\boldsymbol{r}, t) = \varphi(\boldsymbol{r}, t) - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} f(\boldsymbol{r}, t), \end{aligned} \tag{1}$$

$f(\boldsymbol{r}, t)$ 为任意的非奇异函数，电场强度 $\boldsymbol{E}$ 和磁场强度 $\boldsymbol{B}$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{E} &= -\nabla \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{B} &= \nabla \times \boldsymbol{A} \end{aligned} \tag{2}$$

保持不变，故称之为规范不变性，(1)即规范变换（从规范 G 到规

---

〔22〕 参阅：钱伯初，曾谨言. 量子力学习题精选与剖析. 北京：科学出版社，1988. 280.

范 G' 的变换).

考虑带电 q 的粒子(质量 M)在电磁场中的运动.

Newton 力学形式

Newton 方程中

$$M\frac{d^2}{dt^2}\boldsymbol{r} = q\left(\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}\right), \tag{3}$$

只出现场强 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$,而不出现 $\boldsymbol{A}$ 与 φ 本身,方程的规范不变性是明显的.

Lagrange 力学形式

Lagrange 量表示为

$$L(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t) = \frac{1}{2}Mv^2 - q\left[\varphi(\boldsymbol{r},t) - \frac{1}{c}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\right] \tag{4}$$

把 L 代入 Lagrange 方程

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = 0, \quad i = 1,2,3 \tag{5}$$

可得出

$$\frac{d}{dt}\left(M\dot{x}_i + \frac{q}{c}A_i\right) = -q\frac{\partial}{\partial x_i}\varphi + \frac{q}{c}\frac{\partial}{\partial x_i}(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}), i = 1,2,3,$$

即

$$\frac{d}{dt}\left(M\boldsymbol{v} + \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) = -q\nabla\varphi + \frac{q}{c}\nabla(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}).$$

利用

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{A} = \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A} + (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{A},$$

$$\nabla(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{v}\times(\nabla\times\boldsymbol{A}) + (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{A} = \boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B} + (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{A},$$

同样可得出

$$M\frac{d}{dt}\boldsymbol{v} = q\boldsymbol{E} + \frac{q}{c}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}) \tag{6}$$

Hamilton 力学形式

粒子运动状态用正则坐标 $\boldsymbol{r}(t)$和正则动量 $\boldsymbol{P}(t)$描述.正则

动量定义为

$$\boldsymbol{P} = \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{v}} = M\boldsymbol{v} + \frac{q}{c}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{\pi} + \frac{q}{c}\boldsymbol{A}, \tag{7}$$

$$\boldsymbol{\pi} = M\boldsymbol{v}, \tag{8}$$

$\boldsymbol{\pi}$ 称为机械动量.粒子的 Hamilton 量定义为

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{P} - L \\ &= \boldsymbol{v}\cdot\left(M\boldsymbol{v} + \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) - \frac{1}{2}Mv^2 + q\left(\varphi - \frac{1}{c}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}\right) \\ &= \frac{1}{2}Mv^2 + q\varphi,\end{aligned} \tag{9}$$

即

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\left(\boldsymbol{P} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + q\varphi \tag{10}$$

正则方程表示为

$$\dot{\boldsymbol{r}} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{P}}\hat{H}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t), \dot{\boldsymbol{P}} = -\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\hat{H}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{P},t) \tag{11}$$

由此可得出

$$M\ddot{\boldsymbol{r}} = q\left(\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}\right). \tag{12}$$

在规范变换(1)下,坐标 $\boldsymbol{r}$ 和机械动量 $\boldsymbol{\pi}$ 保持不变,

$$\boldsymbol{r}'(t) = \boldsymbol{r}(t),\ \boldsymbol{\pi}'(t) = \boldsymbol{\pi}(t). \tag{13}$$

类似,机械角动量

$$\boldsymbol{\Lambda} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\pi} = M\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v} \tag{14}$$

也保持不变,

$$\boldsymbol{\Lambda}'(t) = \boldsymbol{\Lambda}(t). \tag{15}$$

但正则动量显然依赖规范的选取,

$$\boldsymbol{P} = M\boldsymbol{v} + \frac{q}{c}\boldsymbol{A},$$

$$\boldsymbol{P}' = M\boldsymbol{v} + \frac{q}{c}\boldsymbol{A}',$$

所以(参见(1)式)

$$\boldsymbol{P}' = \boldsymbol{P} + \frac{q}{c}\nabla f(\boldsymbol{r},t). \tag{16}$$

同样,Hamilton 量一般也与规范有关.

$$\begin{aligned}\hat{H}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{P},t) &= \frac{1}{2M}\Big[\boldsymbol{P} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\Big]^2 + q\varphi(\boldsymbol{r},t)\\ &= \frac{1}{2M}\boldsymbol{\pi}^2 + q\varphi(\boldsymbol{r},t)\end{aligned} \tag{17}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}'(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{P}',t) &= \frac{1}{2M}\Big[\boldsymbol{P}' - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r}',t)\Big]^2 + q\varphi'(\boldsymbol{r}',t)\\ &= \frac{1}{2M}\boldsymbol{\pi}'^2 + q\varphi'(\boldsymbol{r},t)\\ &= \frac{1}{2M}\boldsymbol{\pi}^2 + q\varphi'(\boldsymbol{r},t),\end{aligned}$$

$$\hat{H}' = \hat{H} - \frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t}. \tag{18}$$

只在 $\hat{H}$ 不显含 $t(\partial\hat{H}/\partial t = 0)$情况下,可以取 $A(\boldsymbol{r})$和 $\varphi(\boldsymbol{r})$与 t 无关,因而可取$\partial f/\partial t = 0$. 此时

$$\varphi'(\boldsymbol{r}) = \varphi(\boldsymbol{r}) \tag{19}$$

因而

$$\hat{H}' = \hat{H}. \tag{20}$$

Hamilton 量不显含 t 的情况下,Hamilton 量守恒,即能量守恒. 注意,即使在此情况下,$q\varphi$ 可以理解为带电粒子的静电势能,Lagrange(4)式中的另一项 $\frac{q}{c}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}$ 也不能理解为静磁势能,因为 Lorentz 力$\frac{q}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}$ 永远与 $\boldsymbol{v}$ 垂直,对粒子不做功. 这表现在 Hamilton 量中

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\boldsymbol{\pi}^2 + q\varphi(\boldsymbol{r}) = \frac{M}{2}\boldsymbol{v}^2 + q\varphi(\boldsymbol{r}),$$

只有一项机械动能和一项静电势能.

A1.2 量子力学中的规范不变性

从经典力学过渡到量子力学时,经典力学量将代之为相应的厄米算符.如何构造这些算符?通常采用正则量子化程序,即把两个经典力学量的 Poisson 括号

$$\{A, B\} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial x_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial x_i} \right), \tag{21}$$

(式中,x_i,p_i 为体系的正则坐标和动量)化为两个相应算符的对易式

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{A}, \hat{B}] = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}). \tag{22}$$

特别是,对于最基本的两个力学量,正则坐标和正则动量,Poisson 括号

$$\{x_i, p_j\} = \delta_{ij}, \tag{23}$$

化为

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = \delta_{ij}. \tag{24}$$

在 Cartesian 直角坐标系中,一个粒子的坐标算符(取坐标表象)和动量算符通常取为

$$\begin{aligned} \hat{x}_j &= x_j, \\ \hat{p}_j &= -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}. \end{aligned} \tag{25}$$

在曲线坐标系中动量算符的表示式,见附录 2.如采用矢量形式,则

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{r}} &= \boldsymbol{r}, \\ \hat{\boldsymbol{p}} &= -\mathrm{i}\hbar \nabla. \end{aligned} \tag{26}$$

在规范变换下,与经典力学中一样,坐标算符不变.试问,动量算符是否与经典力学中一样,随规范变换而变?但通常作法是,不管选取什么规范,正则动量的算符表示都取为 $-\mathrm{i}\hbar\nabla$,即

$$\hat{\boldsymbol{r}}' = \hat{\boldsymbol{r}},$$
$$\hat{\boldsymbol{p}}' = \hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\,\nabla. \tag{27}$$

在 Feynman 书中,对这种作法的物理考虑,作了一些说明[23].在理论应如何理解?这里应特别提到,在量子力学中,波函数和算符本身都不是直接观测的物理量.观测的只是力学量(算符)的平均值,可取值(本征值)及相应的概率等.与经典力学量直接对应的并不是算符本身,而只是算符的平均值.因此,按照经典力学中在不同规范下坐标和正则动量的关系(见(13)式和(16)式),我们要求坐标算符和正则动量算符的平均值在不同规范下满足[24]

$$\langle\psi'(t)\mid\hat{\boldsymbol{r}}'\mid\psi'(t)\rangle = \langle\psi(t)\mid\hat{\boldsymbol{r}}\mid\psi(t)\rangle, \tag{28}$$

$$\langle\psi'(t)\mid\hat{\boldsymbol{p}}'\mid\psi'(t)\rangle = \langle\psi(t)\mid\hat{\boldsymbol{p}} + \frac{q}{c}\nabla f(\boldsymbol{r},t)\mid\psi(t)\rangle, \tag{29}$$

式中$|\psi(t)\rangle$和$|\psi'(t)\rangle$是同一个量子态在两个规范下的表示,两个规范通过$f(\boldsymbol{r},t)$相联系(见(1)式).注意(29)式中认定:$\hat{\boldsymbol{p}}' = \hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\,\nabla$(见(27)式).下面我们来研究$|\psi'(t)\rangle$和$|\psi(t)\rangle$的关系,以保证(28),(29)式成立.令

$$|\psi'(t)\rangle = T_f\,|\psi(t)\rangle, \tag{30}$$
$$T_f^{\dagger}T_f = T_fT_f^{\dagger} = 1.$$

T_f代表一个幺正变换,与规范变换(1)相联系.

按(27)式$\hat{\boldsymbol{r}}' = \hat{\boldsymbol{r}}$和(28)式要求,有

$$T_f^{\dagger}\hat{\boldsymbol{r}}T_f = \hat{\boldsymbol{r}}. \tag{31}$$

即$[T_f,\hat{\boldsymbol{r}}]=0$,$T_f$与$\hat{\boldsymbol{r}}$对易.注意到$T_f$的幺正性,在坐标表象中,$T_f$可以表示为

---

[23] *The Feynman Lectures on Physics* Vol.3 *Quantum Mechanics*. *New York*: *Addison-Weily*, 1965. 21-5.

[24] Cohen-Tannoudji C, Diu B, Faloë F. *Quantum Mechanics*, New York: John Wiley & Sons, 1977.

$$T_f = e^{i\chi(\boldsymbol{r},t)}, (\chi(\boldsymbol{r},t) \text{实}). \tag{32}$$

用上式代入(29)式,有

$$T_f^{\dagger}\hat{\boldsymbol{p}}'T_f = \hat{\boldsymbol{p}} + \frac{q}{c}\nabla f(\boldsymbol{r},t). \tag{33}$$

注意,$\hat{\boldsymbol{p}}' = \hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$(见(27)式).利用 $e^{-i\chi}(-i\hbar\nabla)e^{i\chi} = -i\hbar\nabla + \hbar\nabla\chi$ 可得

$$\hbar\nabla\chi(\boldsymbol{r},t) = \frac{q}{c}\nabla f(\boldsymbol{r},t), \tag{34}$$

所以

$$\chi(\boldsymbol{r},t) = \frac{q}{\hbar c}f(\boldsymbol{r},t) + f_0(t). \tag{35}$$

如不涉及态随时间的演化,则可以略去 $f_0(t)$,有

$$\chi(\boldsymbol{r},t) = \frac{q}{\hbar c}f(\boldsymbol{r},t), \tag{36}$$

而

$$T_f = \exp\left[\frac{iq}{\hbar c}f(\boldsymbol{r},t)\right]. \tag{37}$$

在坐标表象中,两个规范中的波函数的关系为

$$\psi'(\boldsymbol{r},t) = \exp\left[\frac{iq}{\hbar c}f(\boldsymbol{r},t)\right]\psi(\boldsymbol{r},t). \tag{38}$$

上述结论也可以从 Schrödinger 方程形式在规范变换下保持不变而得出[25].事实上,Schrödinger 方程

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi' &= \left[\frac{1}{2M}\left(\hat{\boldsymbol{p}}' - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}'\right)^2 + q\varphi'\right]\psi', \\ \hat{\boldsymbol{p}}' &= -i\hbar\nabla, \end{aligned} \tag{39}$$

在变化(38)之下,利用

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi' - q\varphi'\psi' = \exp\left(\frac{iq}{\hbar c}f\right)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi - q\varphi\psi\right),$$

---

[25] 曾谨言.量子力学 卷 I.北京:科学出版社,1990.323.

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}'\right)\psi'=\exp\left(\frac{\mathrm{i}q}{\hbar c}f\right)\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\psi,$$

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}'\right)^2\psi'=\exp\left(\frac{\mathrm{i}q}{\hbar c}f\right)\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi.$$

(39)式将回到

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left[\frac{1}{2M}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+q\varphi\right]\psi,\tag{40}$$

$$\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla,$$

即在规范变化(1)下,波函数如作(38)式所示的幺正变换,则Schrödinger方程形式不变.

应该提到,尽管 $\hat{\boldsymbol{p}}'=\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$(算符表示式不变),$\hat{\boldsymbol{p}}$ 的矩阵元要随规范而变.例如

$$\begin{aligned}&\int \mathrm{d}^3r\psi'^*_1(\boldsymbol{r},t)\hat{\boldsymbol{p}}'\psi'_2(\boldsymbol{r},t)=\int \mathrm{d}^3r\psi'^*_1(\boldsymbol{r},t)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\psi'_2(\boldsymbol{r},t)\\&=\int \mathrm{d}^3r\psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\exp\left(-\frac{\mathrm{i}qf}{\hbar c}\right)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\exp\left(\frac{\mathrm{i}qf}{\hbar c}\right)\psi_2(\boldsymbol{r},t)\\&=\int \mathrm{d}^3r\psi_1^*(\boldsymbol{r},t)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\psi_2(\boldsymbol{r},t)+\int \mathrm{d}^3r\psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\frac{q}{c}\nabla f(\boldsymbol{r},t)\psi_2(\boldsymbol{r},t)\\&=\int \mathrm{d}^3r\psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\hat{\boldsymbol{p}}\psi_2(\boldsymbol{r},t)+\int \mathrm{d}^3r\psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\frac{q}{c}\nabla f(\boldsymbol{r},t)\psi_2(\boldsymbol{r},t).\end{aligned}\tag{41}$$

在规范变换下,机械动量的算符表示式要改变(这与正则动量算符不同),即

$$\hat{\boldsymbol{\pi}}=\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t),\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla,\tag{42}$$

将变化为

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{\pi}}'&=\hat{\boldsymbol{p}}'-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r},t),(\hat{\boldsymbol{p}}'=-\mathrm{i}\hbar\nabla)\\&=-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)+\nabla f(\boldsymbol{r},t)]\\&=\hat{\boldsymbol{\pi}}-\frac{q}{c}\nabla f(\boldsymbol{r},t).\end{aligned}\tag{43}$$

但可以证明,机械动量的平均值(与经典力学中机械动量一样)不

随规范变换而异.

至于 Hamilton 量算符,一般要随规范而异.因为

$$\hat{H}=\frac{1}{2M}\left[\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\right]^2+q\varphi(\boldsymbol{r},t),\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla \tag{44}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}'&=\frac{1}{2M}\left[\hat{\boldsymbol{p}}'-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r},t)\right]^2+q\varphi'(\boldsymbol{r},t),\hat{\boldsymbol{p}}'=-\mathrm{i}\hbar\nabla\\&=\frac{1}{2M}\left[\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\right]^2+q\varphi(\boldsymbol{r},t)-\frac{q}{c}\frac{\partial}{\partial t}f(\boldsymbol{r},t)\\&\neq\hat{H}.\end{aligned}\tag{45}$$

除非电磁场不随时间变化,此时 $\boldsymbol{A}$ 和 φ 可取得与 t 无关,而$\partial f/\partial t=0$.此时,$\hat{H}'=\hat{H}$($\hat{H}$ 是守恒量,且规范不变).

从 Schrödinger 方程在规范变换下的变化来看,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi'(t)\rangle=\hat{H}'|\psi'(t)\rangle, \tag{46}$$

在(38)式幺正变换下,$|\psi'(t)\rangle=T_f|\psi(t)\rangle$,$T_f=\exp\left(\frac{\mathrm{i}q}{\hbar c}f(\boldsymbol{r},t)\right)$,

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}T_f|\psi(t)\rangle&=-\frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t}T_f|\psi(t)\rangle+T_f\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle\\&=-\frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t}T_f|\psi(t)\rangle+T_f\hat{H}|\psi(t)\rangle\\&=-\frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t}T_f|\psi(t)\rangle+T_f\hat{H}T_f^{\dagger}T_f|\psi(t)\rangle\\&=\left(-\frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t}+\widetilde{H}\right)T_f|\psi(t)\rangle\\&=\left(-\frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t}+\widetilde{H}\right)|\psi'(t)\rangle,\end{aligned}\tag{47}$$

式中

$$\widetilde{H}=T_f\hat{H}T_f^{\dagger}. \tag{48}$$

利用

$$T_f\varphi(\boldsymbol{r},t)T_f^{\dagger}=\varphi(\boldsymbol{r},t),$$

$$T_f\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\right)^2 T_f^\dagger = T_f\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\right)^2 T_f^\dagger$$

$$= \left(-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) - \frac{q}{c}\nabla f(\boldsymbol{r},t)\right)^2$$

$$= \left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r},t)\right)^2, (\hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla)$$

可得

$$\widetilde{\hat{H}} = \frac{1}{2M}\left[\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r},t)\right]^2 + q\varphi(\boldsymbol{r},t). \tag{49}$$

如要求(46)式成立,则由(47)、(49)式.

$$\hat{H}' = \widetilde{\hat{H}} - \frac{q}{c}\frac{\partial}{\partial t}f(\boldsymbol{r},t)$$

$$= \frac{1}{2M}\left[\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r},t)\right]^2 + q\left[\varphi(\boldsymbol{r},t) - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}f(\boldsymbol{r},t)\right]$$

$$= \frac{1}{2M}\left[\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r},t)\right]^2 + q\varphi'(\boldsymbol{r},t), \tag{50}$$

与(45)式相同.

Hamilton 量的平均值与规范的关系为

$$\langle\psi'|\hat{H}'|\psi'\rangle = \langle\psi|T_f^\dagger\hat{H}'T_f|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|T_f^\dagger\left(\widetilde{\hat{H}} - \frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t}\right)T_f|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi\left|\left(\hat{H} - \frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t}\right)\right|\psi\rangle, \tag{51}$$

与经典力学中关系式(18)相同.

一般说来,在规范变换(1)下,量子态 $|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = T_f|\psi\rangle$,相应算符 $\hat{F} \to \widetilde{\hat{F}} = T_f\hat{F}T_f^\dagger$,如

$$\widetilde{\hat{F}} = \hat{F}', \tag{52}$$

则称 $\hat{F}$ 是规范不变的.例如,坐标 $\boldsymbol{r}$、机械动量 $\boldsymbol{\pi} = M\boldsymbol{v}$,机械角动量 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\pi} = M\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{v}$,等.

附录 2 量子化程序中的问题

A2.1 球坐标系中粒子动量和动能的算符表示

在经典力学中,粒子动能表示式为

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\left(\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}\right)^2, \tag{1}$$

$\mathrm{d}s$ 为空间线段元.在最常用的 Cartesian 直角坐标系中,

$$\mathrm{d}s^2 = \mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}y^2 + \mathrm{d}z^2, \tag{2}$$

所以

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2). \tag{3}$$

按正则动量定义

$$p_x = \partial T/\partial \dot{x} = m\dot{x}, p_y = \partial T/\partial \dot{y} = m\dot{y}, p_z = \partial T/\partial \dot{z} = m\dot{z}, \tag{4}$$

因而

$$T = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2). \tag{5}$$

按照正则量子化规则,经典力学中两个力学量 A 和 B 的 Poi-sson括号 $\{A,B\}$,在量子力学中应代之为两个算符的对易式

$$\{A,B\} \to \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{A},\hat{B}]. \tag{6}$$

特别是最基本的 Poi-sson括号 $\{x_j, p_k\} = \delta_{jk}$,将代之为

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = \mathrm{i}\hbar\delta_{jk}, \tag{7}$$

即

$$[\hat{x},\hat{p}_x] = \mathrm{i}\hbar, [\hat{y},\hat{p}_y] = \mathrm{i}\hbar, [\hat{z},\hat{p}_z] = \mathrm{i}\hbar,$$
$$[\hat{x},\hat{p}_y] = 0, \cdots.$$

通常选用坐标表象,x, y, z 是通常的数,而 p_x, p_y, p_z 则用下列算符来表示,

$$\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x},\hat{p}_y = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial y},\hat{p}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial z}. \tag{8}$$

因而动能 T 相应的算符表示为

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right). \tag{9}$$

在此基础上所作的理论计算都证明是正确的. 特别是 Schrödinger 方程的形式.

现在讨论在球坐标系中动量和动能的表示式. 此时

$$\mathrm{d}s^2 = \mathrm{d}r^2 + r^2\mathrm{d}\theta^2 + r^2\sin^2\theta\mathrm{d}\varphi^2, \tag{10}$$

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\dot{\varphi}^2), \tag{11}$$

$$p_r = \partial T/\partial\dot{r} = m\dot{r}, p_\theta = \partial T/\partial\dot{\theta} = mr^2\dot{\theta}, p_\varphi = \partial T/\partial\dot{\varphi} = mr^2\sin^2\theta\dot{\varphi}, \tag{12}$$

$$T = \frac{1}{2m}\left[p_r^2 + \frac{1}{r^2}p_\theta^2 + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}p_\varphi^2\right]. \tag{13}$$

在过渡到量子力学时, 相应的动量和动能算符如何表示? 有人也许认为, 可以把

$$p_r \to \hat{p}_r = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial r}, p_\theta \to \hat{p}_\theta = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\theta}, p_\varphi \to \hat{p}_\varphi = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{14}$$

因而动能算符表成

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{15}$$

这是完全错误的. 实际上, 利用坐标变换关系式,

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, y = r\sin\theta\sin\varphi, z = r\cos\theta, \tag{16}$$

及逆变换

$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}, \\ \theta = \arctan(\sqrt{x^2+y^2}/z) \\ \varphi = \arctan(y/x) \end{cases} \tag{17}$$

从(9)式可以得出

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\cdot\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{18}$$

这才是正确的，它与(15)式不同.

(14)式和(15)式的错误是多方面的.

首先，$\hat{p}_r = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial r}$并非厄米算符，正确的结果是

$$\hat{p}_r = -\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) = -\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r = \hat{p}_r^{\dagger}. \tag{19}$$

证明：

$\hat{p}_r$的厄米性表现在于：对任意平方可积波函数ψ，要求

$(\psi,\hat{p}_r\psi) = (\hat{p}_r\psi,\psi) = (\psi,\hat{p}_r\psi)^*$，即$(\psi,\hat{p}_r\psi) - (\psi,\hat{p}_r\psi)^* = 0$.

此式左边为

$$\int\mathrm{d}\tau\left[\psi^*\hat{p}_r\psi - (\hat{p}_r\psi)^*\psi\right]$$

$$= -\mathrm{i}\hbar\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{\infty}r^2\mathrm{d}r\left[\psi^*\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\psi) + \left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\psi\right)^*\psi\right].$$

上式中径向积分为

$$\int_0^{\infty}\mathrm{d}r\left[(r\psi^*)\frac{\partial}{\partial r}(r\psi) + (r\psi)\frac{\partial}{\partial r}(r\psi)^*\right]$$

$$= \int_0^{\infty}\mathrm{d}r\frac{\partial}{\partial r}|r\psi|^2 = |r\psi|^2\Big|_0^{\infty} = 0,$$

因为对平方可积波函数，$\lim\limits_{r\to\infty}r\psi = 0$.此外，可以证明，对于满足下列条件$\lim\limits_{r\to 0}r^2V(r) = 0$的势场$V(r)$(通常势场都满足)，波函数在$r\to$

0的渐近行为只能是 $\psi \sim r^l$, $l=0,1,2,\cdots$,才是物理上允许的.因此$\lim\limits_{r\to 0} r\psi=0$.

以上证明了(19)式所示 $\hat{p}_r$ 的厄米性.

$\hat{p}_r$ 的表示式(19)的厄米性还可如下看出:

$i\hbar\dfrac{\partial}{\partial r}=\dfrac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$,由于 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 与 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 不对易,所以 $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial r}$是非厄米算符.为进行厄米化,可把它换为$\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{1}{r}\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\dfrac{\boldsymbol{r}}{r}\right)$.利用(25)式,

$$\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=\nabla\cdot\boldsymbol{e}_r=\frac{\partial}{\partial r}+\boldsymbol{e}_\theta\cdot\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_\varphi\cdot\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\boldsymbol{e}_r$$
$$=\frac{\partial}{\partial r}+\frac{2}{r}\left(\because\ \frac{\partial}{\partial\theta}\boldsymbol{e}_r=\boldsymbol{e}_\theta,\frac{\partial}{\partial\varphi}\boldsymbol{e}_r=\sin\theta\boldsymbol{e}_\varphi\right)$$

得

$$\frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)=\hat{p}_r=\hat{p}_r^\dagger$$

(15)式的错误的根本原因是:在球坐标系中,各单位矢 $\boldsymbol{e}_r,\boldsymbol{e}_\theta,\boldsymbol{e}_\varphi$ 并非常矢,它们依赖于粒子位置 $\boldsymbol{r}$.而在直角坐标系中

$$\boldsymbol{r}=x\boldsymbol{e}_x+y\boldsymbol{e}_y+z\boldsymbol{e}_z \tag{20}$$

各单位矢 $\boldsymbol{e}_x,\boldsymbol{e}_y,\boldsymbol{e}_z$ 为常矢量,与 $\boldsymbol{r}$ 无关.按照

$$\nabla=\boldsymbol{e}_x\frac{\partial}{\partial x}+\boldsymbol{e}_y\frac{\partial}{\partial y}+\boldsymbol{e}_z\frac{\partial}{\partial z}, \tag{21}$$

可以得出

$$\nabla^2=\nabla\cdot\nabla=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}, \tag{22}$$

而 $\hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\nabla$, $\hat{T}=\hat{\boldsymbol{p}}^2/2m=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$. (23)

在球坐标系中,$\boldsymbol{r}=r\boldsymbol{e}_r$, (24)

$$\nabla=\boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{25}$$

$$\nabla^2\neq\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{26}$$

正确的结果应该是(见(18)式)

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{27}$$

事实上,按(19)式,不难求出,

$$\hat{p}_r^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right). \tag{28}$$

(18)式中前两项,正好是 $\hat{p}_r^2/2m$,与经典力学中动能表示式(见(13)式)的第一项对应.(13)式还常写成

$$T = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m}p_r^2 + \frac{1}{2mr^2}\boldsymbol{l}^2, \tag{29}$$

$$\boldsymbol{l}^2 = p_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2\theta}p_\varphi^2 \tag{30}$$

$\boldsymbol{l}^2$ 表示轨道角动量 $\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 的平方.$p_r^2/2m$ 表示"径向动能",而 $\boldsymbol{l}^2/2mr^2 = \boldsymbol{l}^2/2I$, $I = mr^2$ 表示"转动惯量",$\boldsymbol{l}^2/2I$ 表示"转动能".$\boldsymbol{l}^2$ 相应的角动量算符为

$$\hat{\boldsymbol{l}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{31}$$

A2.2 二维粒子在平面极坐标系中动量和动能的算符表示

平面极坐标系中,$ds^2 = d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2$,经典粒子的动能表示为

$$T = \frac{1}{2}m\left(\frac{ds}{dt}\right)^2 = \frac{1}{2}m(\dot{\rho}^2 + \rho^2\dot{\varphi}^2). \tag{1}$$

正则动量为

$$p_\rho = \partial T/\partial\dot{\rho} = m\dot{\rho}, \quad p_\varphi = \partial T/\partial\dot{\varphi} = m\rho^2\dot{\varphi}. \tag{2}$$

所以

$$T = \frac{1}{2m}\left(p_\rho^2 + \frac{1}{\rho^2}p_\varphi^2\right). \tag{3}$$

在进行量子化时,相应的算符如何表示?

有人认为,可以把

$$p_\rho \to \hat{p}_\rho = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\rho}, \quad p_\varphi \to \hat{p}_\varphi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{4}$$

因而动能算符表示成

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{5}$$

但这是错误的.

从直角坐标系中动能算符表示式

$$\hat{T} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right), \tag{6}$$

经过坐标变换,

$$x = \rho\cos\varphi, y = \rho\sin\varphi, \tag{7}$$

逆变换为

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2}, \varphi = \arctan(y/x), \tag{8}$$

可以求出

$$\begin{aligned}\hat{T} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right].\end{aligned} \tag{9}$$

这才是正确的结果.

事实上, $-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\rho}$并非厄米算符.在极坐标系中

$$\boldsymbol{\rho} = \rho\boldsymbol{e}_\rho, \quad \nabla = \boldsymbol{e}_\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{10}$$

$$\frac{\boldsymbol{\rho}}{\rho}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\rho}$$

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\frac{\boldsymbol{\rho}}{\rho} &= -\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{e}_\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\cdot\frac{\boldsymbol{\rho}}{\rho}, (\boldsymbol{\rho}/\rho = \boldsymbol{e}_\rho), \\ &= -\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial\rho} + \boldsymbol{e}_\varphi\cdot\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}\boldsymbol{e}_\rho\right), \quad \left(\frac{\partial}{\partial\varphi}\boldsymbol{e}_\rho = \boldsymbol{e}_\varphi\right) \\ &= -\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho}\right),\end{aligned}$$

所以

$$\frac{1}{2}\left[\frac{\boldsymbol{\rho}}{\rho}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\frac{\boldsymbol{\rho}}{\rho}\right]=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{2\rho}\right)=-\mathrm{i}\hbar\frac{1}{\sqrt{\rho}}\frac{\partial}{\partial\rho}\sqrt{\rho},\tag{11}$$

正确的径向动量算符为

$$\hat{p}_\rho=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{2\rho}\right)=-\mathrm{i}\hbar\frac{1}{\sqrt{\rho}}\frac{\partial}{\partial\rho}\sqrt{\rho}=\hat{p}_\rho^{+}.\tag{12}$$

(12)式所示 $\hat{p}_\rho=\hat{p}_\rho^{+}$(厄米性)还可如下证明:即对于任意平方可积波函数 ψ,可证明$(\psi,\hat{p}_\rho\psi)-(\psi,\hat{p}_\rho\psi)^*=0$.因此式左边为

$$\begin{aligned}&-\mathrm{i}\hbar\cdot\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^\infty\rho\mathrm{d}\rho\left[\psi^*\frac{1}{\sqrt{\rho}}\frac{\partial}{\partial\rho}\sqrt{\rho}\psi-\psi\left(\frac{1}{\sqrt{\rho}}\frac{\partial}{\partial\rho}\sqrt{\rho}\psi\right)^*\right]\\&=-\mathrm{i}\hbar\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^\infty\mathrm{d}\rho\left[(\sqrt{\rho}\psi^*)\frac{\partial}{\partial\rho}\sqrt{\rho}\psi-\sqrt{\rho}\psi\frac{\partial}{\partial\rho}(\sqrt{\rho}\psi)^*\right]\\&=-\mathrm{i}\hbar\int_0^{2\pi}\int_0^\infty\mathrm{d}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}|\sqrt{\rho}\psi|^2=-\mathrm{i}\hbar\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot|\sqrt{\rho}\psi|^2\Big|_0^\infty\\&=0,\end{aligned}$$

因为对于平方可积波函数,$\lim\limits_{\rho\to\infty}\sqrt{\rho}\psi=0$,而对于物理上可接受的波函数,$\lim\limits_{\rho\to0}\sqrt{\rho}\psi=0$.

动能的算符表示式(9)还可如下求出:利用(10)式,

$$\begin{aligned}\nabla^2&=\nabla\cdot\nabla=\left(\boldsymbol{e}_\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\cdot\left(\boldsymbol{e}_\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\&=\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\boldsymbol{e}_\rho\cdot\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)+\boldsymbol{e}_\varphi\cdot\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\boldsymbol{e}_\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\boldsymbol{e}_\varphi\cdot\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\end{aligned}$$

考虑到 $\boldsymbol{e}_\rho\cdot\boldsymbol{e}_\varphi=0,\frac{\partial}{\partial\rho}\boldsymbol{e}_\varphi=0$,上式第二项为0.对于第三项,利用 $\boldsymbol{e}_\varphi\cdot\boldsymbol{e}_\rho=0,\frac{\partial}{\partial\varphi}\boldsymbol{e}_\rho=\boldsymbol{e}_\varphi$,化为$\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}$.第四项化为$\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$.所以

$$\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right].$$

即(9)式.

如 $\hat{p}_\rho$ 取(12)式表示式,可计算出

$$\hat{p}_\rho^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{2\rho}\right)\left(\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{2\rho}\right) = -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{4\rho^2}\right]. \tag{13}$$

在动能的经典表示式(3)中,如 p_ρ^2 用上式代替,p_φ^2 用 $-\hbar^2\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$ 代替,则得出动能算符为

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] + \frac{\hbar^2}{8m\rho^2} \tag{14}$$

与(9)式相比,多出了一项 $\hbar^2/8m\rho^2$.但上式可化为

$$\hat{T} = \frac{1}{2m}\left[\hat{p}_\rho^2 + \frac{1}{\rho^2}\left(\hat{p}_\varphi - \frac{\hbar}{2}\right)\left(\hat{p}_\varphi + \frac{\hbar}{2}\right)\right], \tag{15}$$

式中 $$\hat{p}_\rho = -\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{2\rho}\right), \hat{p}_\varphi = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

与三维粒子动能表示式(A2.1,(29)式)相比,

$$\hat{p}_r \sim \hat{p}_\rho, \boldsymbol{l}^2 \sim (\hat{p}_\varphi - \hbar/2)(\hat{p}_\varphi + \hbar/2). \tag{16}$$

关于动量算符表示式的不定性,Shankar 一书[26]中作过如下讨论.按正则坐标和动量的基本对易式

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = \mathrm{i}\hbar \tag{17}$$

在坐标表象中,通常取 $\hat{x} = x, \hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$.但如把它们换为

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= x, \\ \tilde{p}_x &= -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x} + g(x) \end{aligned} \tag{18}$$

则正则对易式仍成立.但此时,动量本征态将不再是平面波,因

$$\left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x} + g(x)\right]\psi_p(x) = p\psi_p(x) \tag{19}$$

的解不再是 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}$.试问,此时物理情况是否发生了改变? Shankar

---

[26] Shankar R. *Principle of Quantum Mechanics*, New York: Plenum, 1980. 224.

指出：量子力学中波函数本身并非直接观测量，人们观测的只是力学量的本征值，及其测值概率和平均值．动量算符的表示式的上述变化，相当于基矢（坐标的本征态）作了一个幺正变换，

$$|x\rangle \to |\tilde{x}\rangle = e^{if(x)/\hbar}|x\rangle, \qquad (20)$$
$$|x\rangle = e^{-if(x)/\hbar}|\tilde{x}\rangle.$$

式中 $f(x) = \int^{x} dx' g(x'), \quad \frac{\partial f}{\partial x} = g(x)$

在此表象表换下，算符 $\hat{x} \to \tilde{\hat{x}} = \hat{x}$ 不改变，但动量算符 $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ 则变为

$$\begin{aligned}\widetilde{\hat{p}}_x &= e^{-if(x)/\hbar}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)e^{if(x)/\hbar} \\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial f(x)}{\partial x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + g(x).\end{aligned} \qquad (21)$$

在此幺正变换下，观测量不因表象变换而异．

A2.3 Pauli 程序

Pauli[27]给出过在曲线坐标中写出动能算符的程序．设在曲线坐标系 (q^1, q^2, q^3) 中，空间线段元表成

$$ds^2 = \sum_{ij} g_{ij} dq^i dq^j,$$

g_{ij} 为度规张量．令 $\det(g_{ij}) = g$，$g^{ij} = \frac{1}{g}G^{ij}$，$G^{ij}$ 的值为行列式 $\det(g_{ij})$ 中元素 g_{ij} 的余因式，$\sum_j G^{ij}g_{jk} = g\delta^i_k$，而

$$\sum_j g^{ij}g_{jk} = \delta^i_k,$$

g^{ij} 为 g_{ij} 之逆．在此曲线坐标系中，动能算符表示式为

〔27〕 Pauli W. Die Allgemeinen Prinzipen der Wellen Mechanik, Handbuch der Physik, Bd. 24. 1946.

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2,$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{\sqrt{g}}\sum_{i,k}\frac{\partial}{\partial q^i}\sqrt{g}g^{ik}\frac{\partial}{\partial q^k}.$$

例 1　平面极坐标，$ds^2 = d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2$，

$$(g_{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \rho^2 \end{pmatrix}, \det(g_{ij}) = \rho^2, \sqrt{g} = \rho.$$

不难求出

$$(g^{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \rho^{-2} \end{pmatrix},$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\rho\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

例 2　球坐标，$ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta + r^2\sin^2\theta d\varphi^2$，

$$(g_{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2\sin^2\theta \end{pmatrix}, \qquad \begin{aligned} \det(g_{ij}) &= r^4\sin^2\theta, \\ \sqrt{g} &= r^2\sin\theta, \end{aligned}$$

$$(g^{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^{-2} & 0 \\ 0 & 0 & (r^2\sin^2\theta)^{-1} \end{pmatrix},$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

例 3　对称陀螺的动能的经典力学表示式[28]

$$T = \frac{1}{2}\sum_{ij} g_{ij}\dot{q}^i\dot{q}^j = \frac{1}{2}(J_1\omega_1^2 + J_2\omega_2^2 + J_3\omega_3^2),$$

$$J_1 = J_2 = J,$$

(q^1, q^2, q^3)为 Euler 角(α, β, γ)，J_1, J_2, J_3 为主转动惯量，

---

〔28〕 曾谨言．量子力学　卷 II．北京：科学出版社，1991．168～171．

$$\begin{cases} \omega_1 = \sin\gamma\dot{\beta} - \sin\beta \cdot \cos\gamma\dot{\alpha}, \\ \omega_2 = \cos\gamma\dot{\beta} + \sin\beta \cdot \sin\gamma\dot{\alpha}, (\text{Euler 运动学方程}) \\ \omega_3 = \cos\beta\dot{\alpha} + \dot{\gamma}, \end{cases}$$

因此

$$(g_{ij}) = \begin{pmatrix} J\sin^2\beta + J_3\cos^2\beta & 0 & J_3\cos\beta \\ 0 & J & 0 \\ J_3\cos\beta & 0 & J_3 \end{pmatrix},$$

$$g = J^2 J_3 \sin^2\beta,$$

$$(g^{ij}) = \frac{1}{J}\begin{pmatrix} 1/\sin^2\beta & 0 & -\cos\beta/\sin^2\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\cos\beta/\sin^2\beta & 0 & J/J_3 + \cot^2\beta \end{pmatrix},$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2J}\left[\frac{1}{\sin^2\beta}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} - \frac{2\cos\beta}{\sin^2\beta}\frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\gamma} + \left(\frac{J}{J_3} + \cot^2\beta\right)\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2} + \frac{1}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\beta}\sin\beta\frac{\partial}{\partial\beta}\right].$$

3 重力相移

3.1 COW 实验与重力相移

1975 年，Covella，Overhauser 和 Werner[1]利用中子干涉仪测量了重力场引起的中子波函数的相移. 如图 3.1(a)所示，入射热中子束沿与晶体平面的法线方向成 θ 角(Bragg 角)的方向入射. 经过第一块晶片后，分裂成两束相干束 Ⅰ 和 Ⅱ. 然后到达第 2 块晶片，分别在 B 和 C 点改变方向. 然后重新会聚于第 3 块晶片上的 D 点. 最后在探测器 C_1 和 C_2 上测量从第 3 块晶片上出来的中子. 探测器的计数依赖于沿两条路径而来的中子波函数的相对相移.

现在让干涉仪绕水平面内的 AB 轴线旋转 α 角(图 3.1(b)，$\alpha=0$ 时，$ABCD$ 为水平面，$\alpha=90°$时，$ABCD$ 为垂直面). 此时，在中子束运动的平面中，中子感受到的重力加速度为 $g_\alpha = g\sin\alpha$. 在路径 Ⅰ 和 Ⅱ 中的中子所受到的重力势是有差别的. 取 AD 为 x 轴，则在 P_1 点和 P_2 点的中子的势能差为 $\Delta V = mg_\alpha 2x\sin\theta$，$m$ 为中子质量. 因此，经过两条路径到达 D 点的中子波函数的相对相移为(参阅 §2.4，(39)式)

---

〔1〕 Covella R，Overhauser A. W，Werner S A. Phys Rev. Lett.，1975，**34**：1472；更精确的实验见：Staudenmann J L et al. Phys Rev.，1980，**A21**：1419. 中文书可参阅：张永德. 量子力学中的引力效应. 高等物理精编 卷 4. 合肥：中国科技大学出版社，1990.

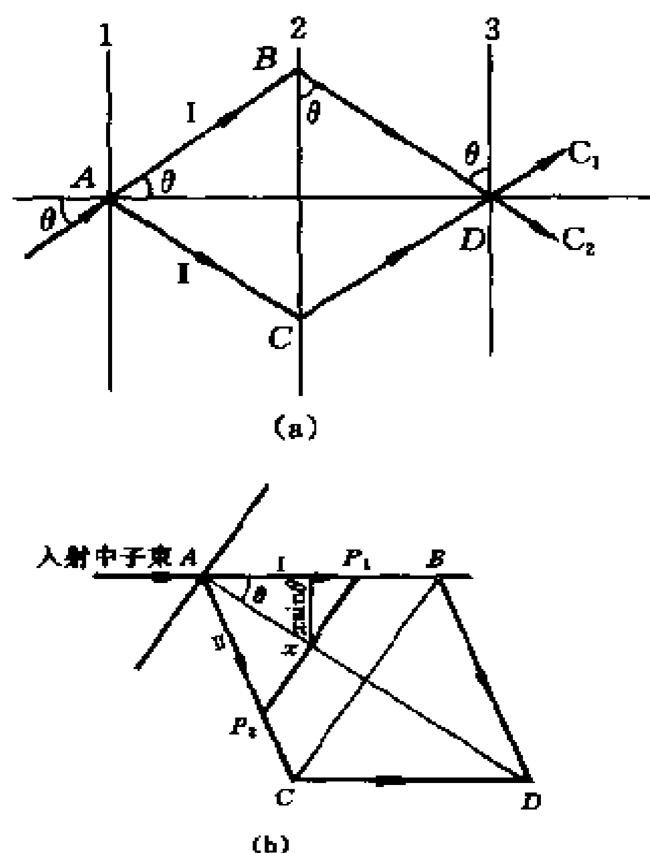


图 3.1 中子干涉仪示意图.
干涉仪的主体部分是在一块长的单晶上琢成的三块平行的单晶片，它们的相对位置是完全固定的.(a)$ABCD$ 面在水平面内.(b)$ABCD$ 面与水平面的夹角为 α，AB 线仍处于水平面内.

$$
\begin{aligned}
\delta\varphi &= -\frac{1}{\hbar}\int_{ACD}^{ABD}\Delta V\mathrm{d}t \\
&= -\frac{2}{\hbar}\int_0^L 2mg_\alpha x\sin\theta\cdot\frac{\mathrm{d}x}{v\cos\theta} \\
&= -\frac{4mg_\alpha\tan\theta}{\hbar v}\frac{L^2}{2} = -A\cdot\left(\frac{mg_\alpha}{\hbar v}\right)
\end{aligned} \tag{1}
$$

式中 $A=2L^2\tan\theta$ 是路径 I 和 II 包围的面积(即 $ABCD$ 的面积)，v 为中子速度，相应的 de Broglie 波长 $\lambda=h/mv$. $\delta\varphi$ 还可以改写成

$$\delta\varphi = -\left[\frac{4\pi\lambda g m^2}{h^2}L^2\tan\theta\right]\sin\alpha \qquad (1')$$

在 COW 实验中，所用中子束波长 $\lambda = 1.445\text{Å}$，($m \sim 10^{-24}\text{g}$，$v \sim 10^5\text{cm}/\text{sec}$)，晶体 Bragg 角 $\theta = 22.1°$. 如取 $\alpha = 90°$，则 $\delta\varphi$ 可达 100rad. 在整个干涉过程中($2L \sim 10\text{cm}$)，中子束保持其相干性. 注意，即使两束中子有这样大的高度差，重力势能差 $\Delta V \sim 10^{-9}\text{eV}$ 仍然非常小(与热中子的动能 $T \sim 10^{-2}\text{eV}$ 相比，要小得多)，但由于相干长度远大于波长($2L/\cos\theta \sim 10^9\lambda$)，尽管在一个周期内的相移 $\sim V/T \sim 10^{-7}$，累计起来可达 $\delta\varphi \sim 100\text{rad}$. 可以看出，$\delta\varphi$ 随倾角 α 而周期变化($\delta\varphi \propto \sin\alpha$)，这已为实验所证实.

在量子力学发展史上，Schrödinger 方程对于说明原子和分子结构以及原子核结构等都取得了巨大成功. 在这些体系中，电磁作用或强作用占支配地位. 在自然界的几种基本作用力中，万有引力的强度是最弱的. 例如，在氢原子中，质子与电子的万有引力只是它们之间的静电(Coulomb)作用的 10^{-40}，因而万有引力的影响完全被静电引力所掩盖. 所以在原子结构中，完全不必考虑万有引力. 在 COW 实验之前，并没有实验证明，Schrödinger 方程对于万有引力起支配作用的体系是否适用. 也许有人认为，万有引力只不过是除电磁作用和强作用之外的另一种基本作用，Schrödinger 方程想当然也同样适用. 在不少量子力学教材中，也对粒子在重力场中的运动和能量本征值等问题进行过讨论. 但这些都只是一种设想，是纯理论上的讨论，终究缺乏实验证据. 而且从等价性原理来看(见 §3.2，与经典力学相反，弱等价原理在量子力学中并不成立)，人们也有理由怀疑 Schrödinger 方程对于万有引力作用的粒子系是否成立. COW 实验的重要性在于，它提供了第一个实验证据，表明 Schrödinger 方程对于万有引力作用的粒子系同样也适用.

3.2 弱等价原理

在经典力学中，设惯性质量为 m 的粒子在万有引力场中运

动.其牛顿方程为

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{F}, \tag{1}$$

$\boldsymbol{F} = -\nabla V, V(\boldsymbol{r}) = m\phi(\boldsymbol{r}) \propto m, \phi(r)$为万有引力势,这里已假定惯性质量与引力质量相同).这样,方程(1)可改写成

$$\ddot{\boldsymbol{r}} = -\nabla\phi, \tag{2}$$

式中不再含有粒子的质量.这表明,在万有引力场中的任何粒子,不管其质量如何,都具有相同的加速度.因此,只要初始位置$\boldsymbol{r}(0)$和初始速度$\dot{\boldsymbol{r}}(0) = \boldsymbol{v}(0)$相同,则所求出的粒子运动轨道$\boldsymbol{r}(t)$,$v(t) = \dot{r}(t)$都相同,不因粒子质量而异.此即经典力学中的弱等价原理(weak equivalence principle).在经典力学中,它反映了粒子在万有引力场中运动的一种整体性的(global)严格的对称性.在牛顿力学建立之前,在Galileo著名的Pisa斜塔实验中,人们已认识到了这一点.

在量子力学中,弱等价原理是否成立?通常认为,它并不成立,除非在经典力学极限情况(或者按照Bohr的对应原理,在大量子数极限下).但在量子力学中,弱等价原理应该如何确切地表述?因为在量子力学中粒子轨道运动的概念,一般说来不再适用.所以这一个问题似乎还有待进一步探讨.下面介绍一下一般的看法.[2]

先举一些最简单的例子.对于自由粒子,de Broglie波长$\lambda = h/p(p = mv)$,就与粒子质量有关(相对论情况也如此).因此,所有干涉现象都与粒子质量有关.还可以想到,大多数物理量的量子化都会与粒子质量有关.例如,类氢原子的圆轨道的半径$r_n = n^2a, a = \hbar^2/me^2$为Bohr半径,依赖于粒子质量.如设想一个质量为$m$的粒子在一个重粒子(质量$M$)的万有引力场中运动,则其轨道半径为($e^2$代之为$GMm$)$r_n = n^2\hbar^2/GMm^2$.又例如最小测不准关系,$\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar/2$,因而$\Delta x \cdot \Delta v \approx \hbar/2m$,对于不同质量$m$的

[2] 例如,参阅:Greenberg D M Rev.Mod.Phys.,1983,55:875.

粒子,如它们具有相同的空间分布 Δx,则其速度分布 Δv 就不同.

量子力学中最基本的方程,Schrödinger 方程,对于重力场,为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+m\phi\right)\psi_n=E_n\psi_n \tag{3}$$

可改写成

$$\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{m}\right)^2\nabla^2+\phi\right]\psi_n=\mathscr{E}_n\psi_n \tag{4}$$

$\mathscr{E}_n=E_n/m$,除量子数 n 之外,$\mathscr{E}_n$ 依赖于参数 $\hbar/m$.所以粒子的能量本征函数 $\psi_n(\boldsymbol{r},\hbar/m)$以及本征能量 $E_n=m\mathscr{E}_n(\hbar/m)$都与粒子质量有关[注].这就是通常人们所说的,在量子力学中弱等效原理不再成立(除非在经典极限下,$\hbar\to0$,或$(\hbar/m)\to0$).

3.3 强等价原理

考虑两个参照系之间的变换

$$x'=x-\xi(t),\quad t'=t \tag{1}$$

则

$$\frac{\partial}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial t'}-\dot{\xi}\frac{\partial}{\partial x'}, \tag{2}$$
$$\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x'}.$$

Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x,t)\right)\psi(x,t) \tag{3}$$

将如何变化? 令

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}f(x',t')/\hbar}u(x',t'). \tag{4}$$

〔注〕 在经典力学中,粒子能量 $E=\frac{1}{2}mv^2+m\phi=m\left(\frac{1}{2}v^2+\phi\right)$,$E/m$ 与粒子质量无关.

则

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t'}-\dot{\xi}\frac{\partial}{\partial x'}\right)e^{if(x',t')/\hbar}u(x',t')$$

$$=e^{if(x',t')/\hbar}\left[i\hbar\frac{\partial u}{\partial t'}-u\frac{\partial f}{\partial t'}\right.$$

$$\left.-i\hbar\dot{\xi}\left(\frac{\partial u}{\partial x'}\right)+\dot{\xi}u\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right)\right],$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)=\frac{\partial}{\partial x'}\left[e^{if(x',t')/\hbar}u(x',t')\right]$$

$$=e^{if/\hbar}\left[\left(\frac{\partial u}{\partial x'}\right)+\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right)u\right],$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)=\frac{\partial}{\partial x'}\left\{e^{if/\hbar}\left[\left(\frac{\partial u}{\partial x'}\right)+\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right)u\right]\right\}$$

$$=e^{if/\hbar}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x'^2}+\frac{2i}{\hbar}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right)\left(\frac{\partial u}{\partial x'}\right)+\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x'^2}\right)u\right.$$

$$\left.-\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right)^2u\right],$$

代入式(3),消去两边的因式 $e^{if/\hbar}$,可得出

$$i\hbar\frac{\partial u}{\partial t'}-u\frac{\partial f}{\partial t'}-i\hbar\dot{\xi}\left(\frac{\partial u}{\partial x'}\right)+\dot{\xi}u\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u}{\partial x'^2}-\frac{i\hbar}{m}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right)\left(\frac{\partial u}{\partial x'}\right)-\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x'^2}\right)u$$

$$+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right)^2u+V(x',t')u \tag{5}$$

参照系$(x,t)\to(x',t')$变换(1)相当于 $x'=x-\xi$,即等价于出现作用力 $-m\ddot{\xi}$,即等价于出现一个引力势 $m\ddot{\xi}x'$.因此要求

$$i\hbar\frac{\partial u}{\partial t'}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+V(x',t')+m\ddot{\xi}x'\right]u \tag{6}$$

用(6)式代入(5)式,相当于要求

$$-\frac{i\hbar}{m}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right)\left(\frac{\partial u}{\partial x'}\right)-\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x'^2}\right)u+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right)^2u$$

$$= -u\left(\frac{\partial f}{\partial t'}\right) - \mathrm{i}\hbar\dot{\xi}\left(\frac{\partial u}{\partial x'}\right) + \dot{\xi}u\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right) + m\ddot{\xi}x'u. \tag{7}$$

这就要求$(\partial u/\partial x')$项和 u 项的系数分别为 0. 对于前一要求，可得

$$-\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right) = -\mathrm{i}\hbar\dot{\xi},$$

由此得出

$$f(x',t) = m\dot{\xi}x' + g(t). \tag{8}$$

对于 u 项系数为 0 的要求

$$-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x'^2}\right) + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right)^2 = -\left(\frac{\partial f}{\partial t'}\right) + \dot{\xi}\left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right) + m\ddot{\xi}x',$$

利用(8)式，可化为 $\dot{g} = \frac{1}{2}m\dot{\xi}^2$，所以 $g(t) = \frac{1}{2}m\int^t(\dot{\xi})^2\mathrm{d}t$，因而

$$f(x',t) = m\left[\dot{\xi}x' + \frac{1}{2}\int^t\dot{\xi}^2\mathrm{d}t\right]. \tag{9}$$

代入(4)式，得$(t'=t)$

$$\psi(x,t) = u(x',t)\exp\left[\frac{\mathrm{i}m}{\hbar}\left(\dot{\xi}x' + \frac{1}{2}\int^t\dot{\xi}^2\mathrm{d}t\right)\right], \tag{10}$$

其中 $u(x',t)$满足(6)式，即$(t'=t)$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}u(x',t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + V(x',t) + m\ddot{\xi}x'\right]u(x',t) \tag{11}$$

对于匀速运动(惯性)参照系，$x' = x - vt$，$t' = t$，$\xi(t) = vt$，$\dot{\xi} = v$，$\ddot{\xi} = 0$，

$$f(x',t) = mvx' + \frac{1}{2}mv^2t, \tag{12}$$

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= u(x',t)\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(mvx' + \frac{1}{2}mv^2t\right)\right]\\ &= u(x',t)\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(mvx - \frac{1}{2}mv^2t\right)\right],\end{aligned} \tag{13}$$

或

$$u(x',t) = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(mvx - \frac{1}{2}mv^2t\right)\right]\cdot\psi(x,t). \tag{14}$$

与下列附录中的式(10)形式上相同.

对于三维运动,相应有

$$\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} - \xi(t), f(\boldsymbol{r}', t) = m\dot{\xi} \cdot \boldsymbol{r}' + \frac{1}{2} m \int^t \dot{\xi}^2 \mathrm{d}t, \tag{15}$$

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = u(\boldsymbol{r}', t) \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar} f(\boldsymbol{r}', t)\right], \tag{16}$$

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}', t)\right]\psi(\boldsymbol{r}, t), \tag{17}$$

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}u(\boldsymbol{r}', t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2 + V(\boldsymbol{r}', t) + m\ddot{\xi} \cdot \boldsymbol{r}'\right]u(\boldsymbol{r}', t). \tag{18}$$

* * *

附录 Schrödinger 方程的 Galileo 不变性.

为运算简单,考虑一维粒子在势场 $V(x, t)$ 中运动. 含时 Schrödinger 方程表示为

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)\right]\psi(x, t) \tag{1}$$

考虑另一个惯性参照系 Σ',它与参照系 Σ 之间用 Galileo 变换联系,

$$\begin{cases} x' = x - vt, \\ t' = t, \end{cases} \tag{2}$$

在 Σ' 中,势能表成 $V'(x', t') = V(x, t) = V(x' + vt, t)$,波函数表示成 $\psi'(x', t')$. 按 Galileo 不变性要求,

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t'}\psi'(x', t') = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + V'(x', t')\right]\psi'(x', t'). \tag{3}$$

令

$$\psi'(x',t') = \psi'(x',t) = e^{iS(x,t)}\psi(x,t), \tag{4}$$

代入(3)式,利用

$$\frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\partial t}{\partial t'}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial x}{\partial t'}\frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial}{\partial x},$$

$$\frac{\partial}{\partial x'} = \frac{\partial t}{\partial x'}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial x}{\partial x'}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x},$$

可得

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\psi'(x',t') &= i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t} + v\frac{\partial}{\partial x}\right)e^{iS(x,t)/\hbar}\psi(x,t) \\ &= e^{iS(x,t)/\hbar}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi - \frac{\partial S}{\partial t}\cdot\psi\right. \\ &\quad \left. + i\hbar v\frac{\partial}{\partial x}\psi - \frac{\partial S}{\partial x}v\psi\right], \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}e^{iS/\hbar}\psi = e^{iS/\hbar}\left[\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)\psi\right],$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2}e^{iS/\hbar}\psi &= e^{iS/\hbar}\left\{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2i}{\hbar}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)\frac{\partial\psi}{\partial x}\right. \\ &\quad \left. + \left[\frac{i}{\hbar}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2\right]\psi\right\}, \end{aligned}$$

消去因子 $e^{iS/\hbar}$ 后,利用(1)式,方程(3)化为

$$\begin{aligned} &-\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)\psi + i\hbar v\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) - v\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)\psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{2i}{\hbar}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) + \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right)\psi - \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2\psi\right]. \end{aligned} \tag{5}$$

要求等式两边的 $\psi(x)$ 项和 $(\partial\psi/\partial x)$ 项的系数分别相等,得出

$$-\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right) + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial t}\right) + v\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right) = 0, \tag{6}$$

$$\frac{\partial S}{\partial x} + mv = 0. \tag{7}$$

(7)式的解可表示为

$$S(x,t) = -mvx + f(t). \tag{8}$$

代入(6)式,得 $\dot{f}(t)=\frac{1}{2}mv^2$,因而 $f(t)=\frac{1}{2}mv^2t+$ 常量.所以除去一个常数相因子外,

$$S(x,t) = -mvx + \frac{1}{2}mv^2t. \tag{9}$$

代入(4)式,得($t'=t$)

$$\psi'(x',t) = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(mvx - \frac{1}{2}mv^2t\right)\right]\psi(x,t) \tag{10}$$

此即两个惯性参照系中 Schrödinger 波函数的变换关系式.此式也可如下得出.考虑 $S(x,t)$ 与势能无关,不妨用自由平面波解在两个参照系中的关系来确定.在两个惯性系中,

$$x' = x - vt, t' = t,$$

$$p' = p - mv,$$

$$E' = \frac{p'^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} - vp + \frac{1}{2}mv^2,$$

自由粒子平面波解

$$\psi(x,t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(px-Et)/\hbar}$$

$$\psi'(x',t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'x'-E't)/\hbar}$$

$$= \mathrm{e}^{\mathrm{i}(px-Et)/\hbar}\cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(mvx-\frac{1}{2}mv^2t\right)}$$

即

$$\psi'(x',t) = \psi(x,t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(mvx-\frac{1}{2}mv^2t\right)}.$$

4 超对称量子力学方法简介

4.1 Schrödinger 的因式分解法

下面先介绍 Schrödinger 处理谐振子的因式分解法和升降算符概念[1][2]. 在近年来发展起来的超对称量子力学方法中,它们又被进一步用以处理一般一维势阱中的粒子.

一维谐振子势 $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 中粒子的能量本征方程为

$$\left(-\frac{\hbar}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi_E(x) = E\psi_E(x). \tag{1}$$

引进无量纲变量

$$\xi = \alpha x, \alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}, \tag{2}$$

并令 $\lambda=E\Big/\left(\frac{1}{2}\hbar\omega\right)=2E/\hbar\omega$,则(1)式化为($\psi_E$ 记为 ψ_λ)

$$D(\xi)\psi_\lambda(\xi) = \lambda\psi_\lambda(\xi),$$

$$D(\xi) = \left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}+\xi^2\right). \tag{3}$$

显然 $D(\xi)$ 可进行因式分解(factorization),不难证明

$$D(\xi) = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}+\xi\right)\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}+\xi\right)-1$$

---

[1] Schrödinger E. Proc. Roy. Irish Acad., 1942, A47: 53.

[2] Infeld L. Hull T E. Rev. Mod. Phys., 1951, 23: 21.

$$= \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi\right)\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right) + 1. \tag{4}$$

为简便,不妨令[注1]

$$a_- = \frac{d}{d\xi} + \xi, \qquad a_+ = -\frac{d}{d\xi} + \xi. \tag{5}$$

则(4)式可改写成

$$a_- a_+ = D + 1, \tag{6a}$$

$$a_+ a_- = D - 1. \tag{6b}$$

利用(6)式和(3)式,可证明[注2]

$$D(a_- \psi_\lambda) = (\lambda - 2)(a_- \psi_\lambda), \tag{7a}$$

$$D(a_+ \psi_\lambda) = (\lambda + 2)(a_+ \psi_\lambda). \tag{7b}$$

由(7a)可知,如 ψ_λ 为 D 的本征态,本征值为 λ,则 $a_-\psi_\lambda$ 也是 D 的本征态,本征值为$(\lambda-2)$.如此继续下去,可知$(a_-)^k\psi_\lambda$ 也是 D 的本征态,本征值为$(\lambda-2k)$,$k=0,1,2,\cdots$.注意,$a_+=(a_-)^+$,$D=a_+a_-$为正定厄米算符,本征值$\geqslant 1$.所以$(\lambda-2k)\geqslant 1$,即 λ 本征值有一个下界 $\lambda_{\min}$.对于相应的本征态 $\psi_{\lambda_{\min}}$,有

$$a_- \psi_{\lambda_{\min}} = 0, \tag{8}$$

即 $a_+a_-\psi_{\lambda_{\min}}=0$,利用(6b)式,得$(D-1)\psi_{\lambda_{\min}}=(\lambda_{\min}-1)\psi_{\lambda_{\min}}=0$,而 $\psi_{\lambda_{\min}}\neq 0$,所以

〔注1〕 通常谐振子的代数解法中,令 $a=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}(i\hat{p}+\xi)$,$\hat{p}=-i\frac{d}{d\xi}$,而 $a^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}(-i\hat{p}+\xi)$.利用$[\xi,\hat{p}]=i$,可得$[a,a^\dagger]=1$,即玻色子算符的基本对易式.

〔注2〕 a_-对(6b)式作用,$a_-a_+a_-\psi_\lambda=(D-1)a_-\psi_\lambda=(\lambda-1)a_-\psi_\lambda$,而左边可用(6a)式化为$(D+1)a_-\psi_\lambda$,所以 $D(a_-\psi_\lambda)=(\lambda-2)a_-\psi_\lambda$.

$$\lambda_{\min} = 1. \tag{9}$$

类似，利用(7b)，可证明，$(a_+)^k\psi_\lambda$ 也是 D 的本征态，本征值为 $(\lambda+2k)$，$k=0,1,2,\cdots$. 联合(9)式，可知 D 的本征值为 $\lambda_n=(2n+1)$，$n=0,1,2,\cdots$. 所以谐振子的能量本征值为

$$E_n = (n+1/2)\hbar\omega, n = 0,1,2,\cdots \tag{10}$$

相应的本征态(未归一化)为 $\psi_n \sim (a_+)^n\psi_0$.

基态波函数 ψ_0 可由 $a_-\psi_0=0$ 求出，即

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}+\xi\right)\psi_0(\xi) = 0. \tag{11}$$

可得 $\psi_0(\xi) \sim e^{-\xi^2/2}$. 归一化后，为

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2x^2/2}. \tag{12}$$

按以上讨论，$a_\pm$ 分别可称为升、降算符. 如图 4.1 所示.

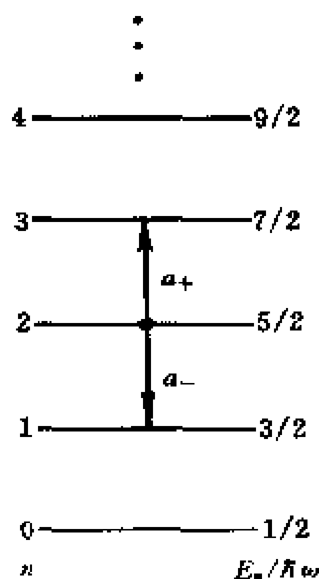


图 4.1　一维谐振子的升、降算符. 由于能级不简并，$a_-a_+\psi_\lambda=(\lambda+1)\psi_\lambda$，即 ψ_λ 经 a_-a_+ 运算后，仍为 ψ_λ 态. 但注意，a_- 并非 a_+ 的逆算符.

4.2 超对称量子力学方法

上面谐振子的解法可推广以处理一维势阱 $V(x)$中粒子的束缚态，即超对称量子力学方法[3-8]．$V(x)$势阱中粒子的能量本征方程为

$$\hat{H}\psi_n(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right]\psi_n(x) = E_n\psi_n(x). \qquad (1)$$

一维规则势场中束缚能级是不简并的．设 $\psi_0(x)$为基态（束缚态）波函数．除两端边界上以外，$\psi_0(x)$无节点．设想 $\psi_0(x)$满足下列能量本征方程，本征值为 0，

$$\hat{H}_-\psi_0(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V_-(x)\right]\psi_0(x) = 0. \qquad (2)$$

显然，简单地把(1)式中 $V(x)$换为 $V_-(x) = V(x) - E_0$，(2)式当然满足，但这是很平庸的．我们不妨进一步探讨一下，还会出现什么新东西．从(2)式可得出

$$V_-(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)}. \qquad (3)$$

因此可把 $\hat{H}_-$写成

$$\hat{H}_- = \frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)}\right]. \qquad (4)$$

容易看出，如令

---

[3] Witten E. Nucl. Phys., 1981, B185:513.

[4] Cooper F. Ginocchio J, Khare A. Phys. Rev., 1987, D36:2458.

[5] Sukumar C V. J. Phys. 1985, A18, , L57, 2917, 2937; 1987; A20:2461.

[6] Cooper F, Khare A, Sukhatme U. Phy. s. Rep., 1995, 251:267.

[7] Dutt R, Khare A, Sukhatme U. Am. J. Phys., 1988, 56:163.

[8] 葛墨林，王育竹．大学物理中的前沿问题．兰州：兰州大学出版社，1987．第 3 章．

$$A = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \frac{\psi_0'}{\psi_0}\right),$$

$$A^{\dagger} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \frac{\psi_0'}{\psi_0}\right), \tag{5}$$

则 $\hat{H}_-$ 可因式分解如下

$$\hat{H}_- = A^{\dagger}A = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V_-(x). \tag{6}$$

注意,$A^{\dagger}$ 与 A 不对易.可以求出

$$\hat{H}_+ = AA^{\dagger} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V_+(x), \tag{7}$$

$$V_+(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)} + \frac{\hbar^2}{m}\frac{\psi_0'(x)^2}{\psi_0(x)^2}. \tag{8}$$

$V_+(x)$与 $V_-(x)$称为超对称伴势(supersymmetric partner potential).$\hat{H}_+$与 $\hat{H}_-$则称为超对称伴 Hamilton 量(supersymmetric partner Hamiltonian).下面将证明,它们的本征值和本征态有很密切的关系.

* * *

练习 对于一维谐振子势,$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$,

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-m\omega x^2/2\hbar},$$

$$\psi_0'(x)/\psi_0(x) = -m\omega x/\hbar,$$

$$\frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)} - \frac{\psi_0'(x)^2}{\psi_0(x)^2} = -m\omega/\hbar, \quad \frac{\psi_0''(x)}{\psi_0(x)} = \frac{m^2\omega^2x^2}{\hbar^2} - \frac{m\omega}{\hbar}.$$

由此可求出

$$V_{\pm}(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \pm \frac{1}{2}\hbar\omega,$$

$$A = \sqrt{\hbar\omega}\left[\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right] = \sqrt{\hbar\omega}\,a,$$

$$A^{\dagger} = \sqrt{\hbar\omega}\left[-\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right] = \sqrt{\hbar\omega}\,a^{\dagger},$$

a 与 a^+ 即谐振子代数解法中的降算符和升算符. 此外, $\hat{H}_\pm = \hat{H} \pm \frac{1}{2}\hbar\omega$ 可表示为

$$\hat{H}_- = A^\dagger A = \hbar\omega\left[-\frac{\hbar}{2m\omega}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right] - \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right] - \frac{1}{2}\hbar\omega = \hbar\omega a^+ a,$$

$$\hat{H}_+ = AA^\dagger = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right] + \frac{1}{2}\hbar\omega = \hbar\omega a a^\dagger.$$

*　　　　*　　　　*

下面证明, 除 $\hat{H}_-$ 的基态能量为 0 之外, $\hat{H}_-$ 与 $\hat{H}_+$ 具有相同的能谱(见(13)式), 而且本征函数有密切的对应关系(见(14)与(15)式).

首先, 从 A 的定义式(5), 可看出

$$A\psi_0 = 0, (\text{但 } A^\dagger\psi_0 \neq 0). \tag{9}$$

设

$$\hat{H}_- \psi_n^{(-)} = E_n^{(-)}\psi_n^{(-)}, \hat{H}_+ \psi_n^{(+)} = E_n^{(+)}\psi_n^{(+)}. \tag{10}$$

则

$$\hat{H}_+ A\psi_n^{(-)} = AA^\dagger A\psi_n^{(-)} = A\hat{H}_- \psi_n^{(-)} = E_n^{(-)}A\psi_n^{(-)}, \tag{11}$$

可见, 如 $\psi_n^{(-)}$ 是 $\hat{H}_-$ 的本征态(对应本征值 $E_n^{(-)}$), 则 $A\psi_n^{(-)}$ 为 $\hat{H}_+$ 的本征态, 而且对应本征值也是 $E_n^{(-)}$. 类似,

$$\hat{H}_- A^\dagger\psi_n^{(+)} = A^\dagger AA^\dagger\psi_n^{(+)} = A^\dagger\hat{H}_+ \psi_n^{(+)} = E_n^{(+)}A^\dagger\psi_n^{(+)},$$

即, 如 $\psi_n^{(+)}$ 是 $\hat{H}_+$ 本征态(对应本征值 $E_n^{(+)}$), 则 $A^\dagger\psi_n^{(+)}$ 为 $\hat{H}_-$ 的本征态, 而且对应本征值也是 $E_n^{(+)}$.

我们注意到, $A\psi_0 = 0$, ($A^\dagger\psi_0 \neq 0$). 所以 $\hat{H}_-\psi_0 = 0$. ψ_0 是 $\hat{H}_-$ 的本征态, 本征值为 0, $E_0^{(-)} = 0$, 可以把 ψ_0 记为 $\psi_0^{(-)}$. 注意, $\psi_0^{(-)}$ 不是 $\hat{H}_+$ 本征态. 除 $\hat{H}_-$ 的基态 $\psi_0^{(-)}$ 之外, $\hat{H}_+$ 与 $\hat{H}_-$ 的本征谱完全相同. 可以看出

$$E_n^{(+)} = E_{n+1}^{(-)}, n = 0,1,2,\cdots. \tag{12}$$

例如，在(11)式中把 $n\to n+1$，利用(12)式，则有

$$\hat{H}_{+}A\psi_{n+1}^{(-)}=E_{n+1}^{(-)}A\psi_{n+1}^{(-)}=E_{n}^{(+)}A\psi_{n+1}^{(-)}. \tag{13}$$

试与 $\hat{H}_{+}\psi_{n}^{(+)}=E_{n}^{(+)}\psi_{n}^{(+)}$ 比较，并考虑到一维规则势阱的束缚态是不简并的，我们可得

$$A\psi_{n+1}^{(-)}\sim\psi_{n}^{(+)},$$

考虑归一化条件后，可得

$$\psi_{n}^{(+)}=(E_{n+1}^{(-)})^{-1/2}A\psi_{n+1}^{(-)},n=0,1,2,\cdots. \tag{14}$$

类似有

$$\psi_{n+1}^{(-)}=(E_{n}^{(+)})^{-1/2}A^{\dagger}\psi_{n}^{(+)},n=0,1,2,\cdots. \tag{15}$$

概括起来，$\hat{H}_{\pm}$ 的本征谱和本征态的关系如下：

$\hat{H}_{-}$			$\hat{H}_{+}$	
$\vdots$			$\vdots$	
$E_{3}^{(-)}$	$\psi_{3}^{(-)}\sim A^{\dagger}\psi_{2}^{(+)}$	……	$E_{2}^{(+)}$	$\psi_{2}^{(+)}\sim A\psi_{3}^{(-)}$
$E_{2}^{(-)}$	$\psi_{2}^{(-)}\sim A^{\dagger}\psi_{1}^{(+)}$	……	$E_{1}^{(+)}$	$\psi_{1}^{(+)}\sim A\psi_{2}^{(-)}$
$E_{1}^{(-)}$	$\psi_{1}^{(-)}\sim A^{\dagger}\psi_{0}^{(+)}$	……	$E_{0}^{(+)}$	$\psi_{0}^{(+)}\sim A\psi_{1}^{(-)}$
$E_{0}^{(-)}=0$	$\psi_{0}^{(-)}$			

$\hat{H}_{+}$ 能谱

$\hat{H}_{-}$ 能谱

超势(superpotential)

在超对称量子力学方法中，常引进超势来代替 $\psi_0(x)$. 定义超势

$$W(x)=-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} \tag{16}$$

反之，

$$\psi_0(x)=\exp\left[-\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int^{x}\mathrm{d}xW(x)\right]. \tag{17}$$

$W(x)$要求保证 $\psi_0(x)$平方可积. 利用超势, A 和 $A^\dagger$ 可表为

$$A=\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+W(x),\ A^\dagger=-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+W(x). \tag{18}$$

由此可得出

$$A^\dagger A=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+W(x)^2-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x), \tag{19}$$

$$AA^\dagger=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+W(x)^2+\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x). \tag{20}$$

代人式(6)和(7), 有

$$\begin{aligned}\hat{H}_-=A^\dagger A&=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+W(x)^2-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x)\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_-(x),\end{aligned} \tag{21}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_+=AA^\dagger&=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+W(x)^2+\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x)\\&=-\frac{\hbar}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_+(x).\end{aligned} \tag{22}$$

其中〔注〕

$$V_\pm(x)=W(x)^2\pm\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x). \tag{23}$$

此可得

$$\frac{1}{2}[V_+(x)+V_-(x)]=W(x)^2, \tag{24}$$

〔注〕 按 $W(x)$定义式(16), 可得 $W'(x)=-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\left(\frac{\psi_0''}{\psi_0}-\frac{\psi_0'^2}{\psi_0^2}\right)$, 所以

$$-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\psi_0''}{\psi_0}-\frac{\psi_0'^2}{\psi_0^2}\right)$$

即
$$W(x)^2-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x)=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi_0''}{\psi_0}=V_-(x). \tag{27}$$

这是超势 $W(x)$满足的一阶非线性微分方程. 其解法可参阅文献[5].

$$\frac{1}{2}[V_+(x) - V_-(x)] = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x). \tag{25}$$

把 $\hat{H}_-$ 与 $\hat{H}_+$ 联合起来,写成超对称 Hamilton 量形式,

$$\begin{aligned}\hat{H}_s &= \begin{pmatrix} \hat{H}_- & 0 \\ 0 & \hat{H}_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^\dagger A & 0 \\ 0 & AA^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + W(x)^2\right] - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x)\sigma_3,\end{aligned} \tag{26}$$

$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$是 Pauli 矩阵.

对于谐振子,$\psi'_0(x)/\psi_0(x) = -\frac{m\omega}{\hbar}x$,

$$W(x) = \sqrt{\frac{m}{2}}\omega x, W(x)^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2,$$

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x) = \frac{1}{2}\hbar\omega,$$

$$V_\pm(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \pm \frac{1}{2}\hbar\omega.$$

例 1 无限深方势阱[7]

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leqslant x \leqslant L \\ \infty, & x < 0, x > L \end{cases} \tag{28}$$

能量本征函数为

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{(n+1)\pi x}{L}, 0 \leqslant x \leqslant L, n = 0,1,2,\cdots. \tag{29}$$

相应能量本征值

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{(n+1)^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = (n+1)^2E_0, \\ E_0 &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \quad (\text{基态能量}). \end{aligned} \tag{30}$$

显然

$$V_-(x) = V(x) - E_0 = V(x) - \pi^2\hbar^2/2mL^2. \tag{31}$$

利用 $\psi_0(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$，可求出

$$W(x)=-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\psi_0'}{\psi_0}=-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\pi}{L}\cot\left(\frac{\pi x}{L}\right),\tag{32}$$

$$A=\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+W(x)=\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-\frac{\pi}{L}\cot\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right],\tag{33}$$

$$W'(x)=\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\pi^2}{L^2}\csc^2\left(\frac{\pi x}{L}\right),$$

$$V_+(x)=W(x)^2+\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x)=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\left(2\csc^2\frac{\pi x}{L}-1\right)$$

$$=\frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2}\left(\cot^2\frac{\pi x}{L}+\frac{1}{2}\right).\tag{34}$$

利用 A，可以构造出 $\psi_n^{(+)}(x)$.（未归一化）

$$\psi_0^{(+)}(x)\sim\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-\frac{\pi}{L}\cot\frac{\pi x}{L}\right)\sin\left[\frac{(n+2)\pi x}{L}\right]$$

特别是，最低两条能级的波函数为

$$\psi_0^{(+)}(x)\sim\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-\frac{\pi}{L}\cot\frac{\pi x}{L}\right)\sin\frac{2\pi x}{L}\propto\sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right),$$

$$\psi_1^{(+)}(x)\sim\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-\frac{\pi}{L}\cot\frac{\pi x}{L}\right)\sin\frac{3\pi x}{L}\propto\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\cdot\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right).$$

以上结果是人们过去已知的，即无限深方势阱的能谱，除基态外，与 $\frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2}\cot^2\frac{\pi x}{L}$（即 $V_+(x)$）势相同（见本章末附录 3）.

例 2　δ 势

δ 势阱　$V(x)=-\gamma\delta(x)(\gamma>0)$中粒子只有一条束缚能级

$$E_0=-m\gamma^2/2\hbar^2,\tag{35}$$

$$\psi_0(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}\mathrm{e}^{-|x|/L},\ L=\hbar^2/m\gamma.\tag{36}$$

超势 $W(x)$是不连续的阶梯函数

$$W(x)=-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}[\ln\psi_0(x)]'=\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{1}{L}|x|'$$

$$= \frac{\hbar}{\sqrt{2mL}}[2\varepsilon(x) - 1], \tag{37}$$

$$\varepsilon(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x > 0. \end{cases}$$

所以

$$V_+(x) + V_-(x) = 2W(x)^2 = \frac{\hbar^2}{mL^2} = \frac{m\gamma^2}{\hbar^2},$$

$$V_+(x) - V_-(x) = \frac{2\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x) = 2\gamma\delta(x),$$

两式相减,得

$$V_-(x) = -\gamma\delta(x) + m\gamma^2/2\hbar^2 = -\gamma\delta(x) - E_0, \tag{38}$$

两式相加,得

$$V_+(x) = \gamma\delta(x) + m\gamma^2/2\hbar^2 = \gamma\delta(x) + E_0, \tag{39}$$

是 δ 势垒,不存在束缚能级.

例 3 双 δ 势阱[9]

双 δ 势阱

$$V(x) = -\gamma[\delta(x+a) + \delta(x-a)], \gamma > 0 \tag{40}$$

的束缚态($E<0$)的能级由下式给出(参阅 § 9.5,(4),(5)式)

$$\begin{aligned} 2a/L &= \beta a(\tanh\beta a + 1), \text{偶宇称态}, \\ 2a/L &= \beta a(\coth\beta a + 1), \text{奇宇称态}, \end{aligned} \tag{41}$$

式中 $\beta = \sqrt{-2mE}/\hbar$, $L = \hbar^2/m\gamma$(δ 势的特征长度)。基态(偶宇称)能量可以用图解法求出,即求下列两条线

$$y_1 = \beta a(\tanh\beta a + 1),$$

$$y_2 = 2a/L,$$

的交点(以 βa 为横坐标). y_1 为单调上升曲线,y_2 为一条水平线.交点坐标记为 $\beta_0 a$,则基态能量 E_0 为

---

[9] Goldstein J. Am. J. Phys., 1994, 62: 612.

$$E_0 = -\frac{\hbar^2\beta_0^2}{2m}. \tag{42}$$

基态波函数(偶宇称)表为

$$\psi_0(x) = \begin{cases} A e^{\beta_0 x}, & x \leqslant -a, \\ e^{\beta_0 x} + e^{-\beta_0 x}, & -a < x < a, \\ A e^{-\beta_0 x}, & x \geqslant a. \end{cases} \tag{43}$$

所以 $W(x) = -\hbar/\sqrt{2m}(\ln\psi_0)'$ 为

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\begin{cases} \beta_0, & x \leqslant -a \\ \beta_0 \tanh\beta_0 x, & -a < x < a \\ -\beta_0, & x \geqslant a. \end{cases} \tag{44}$$

而

$$W(x)^2 = -E_0\begin{cases} 1, & x \leqslant -a \\ \tanh^2\beta_0 x, & |x| < a \\ 1, & x \geqslant a \end{cases}$$

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x) = E_0\begin{cases} -(\tanh\beta_0 a + 1)\delta(x+a), \\ \mathrm{sech}^2\beta_0 x \\ (1 - \tanh\beta_0 a)\delta(x-a), \end{cases}$$

由此可求出 $V_\pm(x) = W(x)^2 \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x)$,其中

$$V_-(x) = V(x) + \hbar^2\beta_0^2/2m. \tag{45}$$

相应的 $\hat{H}_- = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_-(x)$的基态能量为 0. 而伴势 $V_+(x)$ 为

$$V_+(x) = -V(x) - \frac{\hbar^2\beta_0^2}{2m} + 2W(x)^2, \tag{46}$$

是一个排斥势,无束缚态.

4.3 形状不变性

非相对论量子力学中有一些一维势阱的束缚态有解析解.其原因何在?它们有什么内在的对称性?Gendenshtein[10]引进了"形状不变性"(shape invariance)对此问题作了深入的探讨.

定义:如 $V_{\pm}(x)$满足下列条件

$$V_{+}(x;a_0)=V_{-}(x;a_1)+R(a_1),\tag{1}$$

式中 a_0 代表一个(一组)参数,a_1 为 a_0 的函数 $a_1=f(a_0)$,(1)式中的余式 $R(a_1)$与 x 无关,则称势 $V_{\pm}$ 具有形状不变性.(1)式表明 V_{+}与 V_{-}的函数形式相似,只是参数不同.

具有形状不变性的势阱的束缚态能级可如下求出.试构造如下 Hamilton 量系列(hierarchy of Hamiltonian)

$$\hat{H}^{(s)},s=0,1,2,\cdots,\tag{2}$$

其中 $$\hat{H}^{(0)}=\hat{H}_{-},\hat{H}^{(1)}=\hat{H}_{+},\cdots,$$

$$\hat{H}^{(s)}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_{-}(x;a_s)+\sum_{k=1}^{s}R(a_k),\tag{3}$$

$$a_s=f^s(a_0)=\underbrace{f[f[\cdots[f}_{f\text{函数运算}s\text{次}}(a_0)]\cdots].$$

例如 $a_1=f(a_0),a_2=f(a_1)=f(f(a_0)),\cdots$.

可以看出,$\hat{H}^{(s+1)}$和 $\hat{H}^{(s)}$有下列关系

$$\begin{aligned}\hat{H}^{(s+1)}&=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_{-}(x;a_{s+1})+\sum_{k=1}^{s+1}R(a_k)\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_{+}(x;a_s)+\sum_{k=1}^{s}R(a_k).\end{aligned}\tag{4}$$

比较(3)式与(4)式,可见从 $\hat{H}^{(s)}\rightarrow\hat{H}^{(s+1)}$,只在于把 $v_{-}(x;a_s)\rightarrow$

---

[10] Gendenshtein L. JETP Lett., 1983, **38**: 356.

$V_+(x;a_s)$，而余式部分（与 x 无关！）$\sum_{k=1}^{s}R(a_k)$ 完全相同．通常称 $\hat{H}^{(s+1)}$ 和 $\hat{H}^{(s)}$ 为 supersymmetric partner Hamiltonian．按上节的分析，除 $\hat{H}^{(s)}$ 的最低的一条能级之外，$\hat{H}^{(s)}$ 的各激发能级与 $\hat{H}^{(s+1)}$ 的各能级完全相同（$\hat{H}^{(s)}$ 是与 $V_-(x;a_s)$ 势相应，$\hat{H}^{(s+1)}$ 则与 $V_+(x;a_s)$ 相应，余式部分不依赖于 x）．

现在来考虑系列 $\hat{H}^{(n)}\to\hat{H}^{(n-1)}\to\hat{H}^{(n-2)}\to\cdots\to\hat{H}^{(1)}=\hat{H}_+\to\hat{H}^{(0)}=\hat{H}_-$，其中最后一环中 $\hat{H}^{(0)}=\hat{H}_-$ 的最低能级 $E_0^{(-)}=0$，而

$$\hat{H}^{(0)}=\hat{H}_-=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_-(x;a_0),\tag{5}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}^{(1)}=\hat{H}_+&=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_-(x;a_1)+R(a_1)\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_+(x;a_0),\end{aligned}\tag{6}$$

$\hat{H}^{(1)}$ 与 $\hat{H}^{(0)}$（除 $\hat{H}^{(0)}$ 的最低能级 $E_0^{(-)}=0$ 外）具有相同的能谱．从(6)式可看出，$\hat{H}^{(1)}$ 的最低束缚能级（如存在的话）为 $R(a_1)$．如此继续上推，可知 $\hat{H}^{(s)}$ 的最低能级（如存在的话）为

$$E_0^{(s)}=\sum_{k=1}^{s}R(a_k).\tag{7}$$

由此可以得出，原来的 $V_-(x;a_0)$ 势阱（基态 $E_0^{(-)}$ 取为 0）的第 n 激发束缚态（如存在的话）能量为

$$E_n^{(-)}=\sum_{k=1}^{n}R(a_k).\tag{8}$$

例 $V(x)=-V_0\mathrm{sech}^2\beta x$，$(V_0>0)$

能量本征态可以严格求解（见本章末附录 2）．基态（偶宇称，$n=0$）能量和波函数为

$$E_0 = -\frac{\hbar^2\beta^2}{8m}\left[\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\beta^2}+1}-1\right]^2,$$

$$\psi_0(x) \sim (\mathrm{sech}\beta x)^s, s = 2\lambda = \frac{1}{2}\left[\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\beta^2}+1}-1\right]. \quad (9)$$

相应的超势

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}[\ln\psi_0(x)]' = \alpha\tanh\beta x,$$
$$\alpha = \frac{\hbar\beta s}{\sqrt{2m}}. \quad (10)$$

因此 $$W'(x) = \alpha\beta\mathrm{sech}^2\beta x,$$

$$V_-(x;\alpha) = \alpha^2(1-\mathrm{sech}^2\beta x) - \alpha\beta\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\mathrm{sech}^2\beta x$$
$$= \alpha^2 - \alpha\left(\alpha+\frac{\hbar\beta}{\sqrt{2m}}\right)\mathrm{sech}^2\beta x, \quad (11)$$

$$V_+(x;\alpha) = \alpha^2 - \alpha\left(\alpha-\frac{\hbar\beta}{\sqrt{2m}}\right)\mathrm{sech}^2\beta x. \quad (12)$$

可以看出,

$$V_-\left(x;\alpha-\frac{\hbar\beta}{\sqrt{2m}}\right) = \left(\alpha-\frac{\hbar\beta}{\sqrt{2m}}\right)^2 - \left(\alpha-\frac{\hbar\beta}{\sqrt{2m}}\right)\alpha\,\mathrm{sech}^2\beta x$$
$$= V_+(x;\alpha) - \alpha^2 + \left(\alpha-\frac{\hbar\beta}{\sqrt{2m}}\right)^2,$$

或

$$V_+(x;\alpha) = V_-\left(x;\alpha-\frac{\hbar\beta}{\sqrt{2m}}\right) + \alpha^2 - \left(\alpha-\frac{\hbar\beta}{\sqrt{2m}}\right)^2. \quad (13)$$

与(1)式相比,可看出

$$a_0 = \alpha, a_1 = f(a_0) = f(\alpha) = \alpha - \frac{\hbar\beta}{\sqrt{2m}},$$

$$R(a_1) = a_0^2 - a_1^2.$$

而 $$a_s = f^s(a_0) = a - s\hbar\beta/\sqrt{2m}, s = 0,1,2,\cdots \tag{14}$$

因此 $V_-(x;\alpha) = V_-(x;a_0)$的第 n 条束缚能级为

$$\begin{aligned}
E_n^{(-)} &= \sum_{k=1}^{n} R(a_k) = \sum_{k=1}^{n}(a_{k-1}^2 - a_k^2) = a_0^2 - a_n^2 \\
&= \alpha^2 - (\alpha - n\hbar\beta/\sqrt{2m})^2 \\
&= \frac{\hbar^2\beta^2}{2m}[s^2 - (s-n)^2] \\
&= \frac{\hbar^2\beta^2}{2m}\left\{\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\beta^2}+1} - \frac{1}{2}\right]^2\right. \\
&\quad \left. - \left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\beta^2}+1} - (n+1/2)\right]^2\right\},
\end{aligned} \tag{15}$$

显然 $E_0^{(-)} = 0$. 上式结果即附录 2 所给出的 $V(x) = -V_0\mathrm{sech}^2\beta x$ 的能级(取 E_0 为参照)($E_n - E_0$)(见附录 2,(13)式).

附录 1 超对称谐振子及其推广[8,11]

A1.1 超对称谐振子

谐振子的代数解法中,引进了产生和湮灭算符(采用自然单位 $\hbar = m = \omega = 1$)

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x\right), a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x\right). \tag{1}$$

---

[8] 参阅:葛墨林,王育竹.大学物理中的前沿问题.兰州大学出版社,1987.第三章.该书对量子力学中的超对称性有较详细论述.本附录写作时,参照了该书的讲法.

[11] Haymaker R W, A P Rau. Am. J. Phys., 1986, **54**:928.

它们满足玻色子对易关系

$$[a, a^{\dagger}] = 1. \tag{2}$$

而谐振子的 Hamilton 量可以表示成

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}x^2 = (a^{\dagger}a + 1/2) = (\hat{n} + 1/2), \\ \hat{n} &= a^{\dagger}a(\text{玻色子数算符}). \end{aligned} \tag{3}$$

容易证明

$$[\hat{n}, a^{\dagger}] = a^{\dagger}, [\hat{n}, a] = -a. \tag{4}$$

所以 $a, a^{\dagger}, \hat{n} = a^{\dagger}a, 1$ 构成一个最简单的 Lie 代数，习惯上称为 Heisenberg-Weyl 代数.

现在来进行推广.引进费米子产生和湮灭算符 $\psi^{\dagger}$ 和 ψ，满足下列反对易式

$$\{\psi, \psi^{\dagger}\} = 1, \{\psi, \psi\} = 0, \{\psi^{\dagger}, \psi^{\dagger}\} = 0. \tag{5}$$

其最简单的表示，即二维表示，可记为

$$\psi = \sigma_{+} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \psi^{\dagger} = \sigma_{-} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{6}$$

注意，$[\psi, \psi^{\dagger}] = [\sigma_{+}, \sigma_{-}] = \sigma_3$ （Pauli 矩阵）.

为把费米子和玻色子联系起来，引进超对称变换

$$Q = a\psi^{\dagger} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a & 0 \end{pmatrix}, Q^{\dagger} = a^{\dagger}\psi = \begin{pmatrix} 0 & a^{\dagger} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{7}$$

Q 湮灭一个玻色子并产生一个费米子，$Q^{\dagger}$ 则正相反.显然

$$Q^2 = 0, \quad Q^{\dagger 2} = 0, \tag{8}$$

$$\{Q, Q^{\dagger}\} = QQ^{\dagger} + Q^{\dagger}Q = \begin{pmatrix} a^{\dagger}a & 0 \\ 0 & aa^{\dagger} \end{pmatrix}. \tag{9}$$

引进超对称谐振子 Hamilton 量

$$\hat{H}_s = \{Q, Q^\dagger\} = \begin{pmatrix} a^\dagger a & 0 \\ 0 & aa^\dagger \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \hat{n} & 0 \\ 0 & \hat{n}+1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}-1/2 & 0 \\ 0 & \hat{H}+1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}_- & 0 \\ 0 & \hat{H}_+ \end{pmatrix}, \quad (10)$$

式中 $\hat{H}$ 是谐振子 Hamilton 量，$\hat{H}_- = a^\dagger a = \hat{H} - 1/2$ 与 $\hat{H}_+ = aa^\dagger = \hat{H} + 1/2$ 称为超对称伴 Hamilton 量. 容易证明

$$\begin{aligned} &[Q, \hat{H}_s] = 0, [Q^\dagger, \hat{H}_s] = 0, \\ &\{Q, Q\} = 0, \{Q^\dagger, Q^\dagger\} = 0, \{Q, Q^\dagger\} = \hat{H}_s. \end{aligned} \quad (11)$$

即 $Q, Q^\dagger, \hat{H}_s$ 构成最简单的超 Lie 代数 $SL(1,1)$.（(11)式中既有对易式，也有反对易式）.

可以引进厄米算符 Q_1 和 Q_2 代替 Q 和 $Q^\dagger$，令

$$\begin{aligned} &Q_1 = Q + Q^\dagger = Q_1^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & a^\dagger \\ a & 0 \end{pmatrix}, \\ &Q_2 = \mathrm{i}(Q - Q^\dagger) = Q_2^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i}a^\dagger \\ \mathrm{i}a & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (12)$$

其逆表示式为

$$Q^\dagger = \frac{1}{2}(Q_1 + \mathrm{i}Q_2), Q = \frac{1}{2}(Q_1 - \mathrm{i}Q_2). \quad (13)$$

容易证明

$$\begin{aligned} &\{Q_1, Q_2\} = 0 \quad (\text{但}[Q_1, Q_2] \neq 0) \\ &Q_1^2 = Q_2^2 = \{Q, Q^\dagger\} = \hat{H}_s. \end{aligned} \quad (14)$$

这样厄米算符 $Q_1, Q_2, \hat{H}_s$ 满足下列代数关系

$$\begin{aligned} &[Q_i, \hat{H}_s] = 0, \\ &\{Q_i, Q_j\} = 2\delta_{ij}\hat{H}_s. \end{aligned} \quad (15)$$

超对称谐振子的能谱具有如下特征：

(1)因 $Q_1 = Q_1^\dagger, Q_2 = Q_2^\dagger$，所以 $\hat{H}_s = Q_1^2 = Q_2^2$ 为正定厄米算符，它的能量本征值为非负.

(2)$\hat{H}_s$ 的非零本征值为二重简并.

证明：考虑到$[Q_1,\hat{H}_s]=[Q_2,\hat{H}_s]=0$，即 Q_1 和 Q_2 为守恒量. 但由于$[Q_1,Q_2]\neq 0$，不对易. 所以 $\hat{H}_s$ 的本征值一般有简并（除 0 本征值外）[12].

试求 Q_1 与 $\hat{H}_s$ 共同本征态 ψ_1，$Q_1\psi_1=\lambda_1\psi_1$，$\hat{H}_s\psi_1=Q_1^2\psi_1=\lambda_1^2\psi_1$. 试问 $Q_2\psi_1$ 是否 $\hat{H}_s$ 本征态？是. 因为 $\hat{H}_sQ_2\psi_1=Q_2\hat{H}_s\psi_1=\lambda_1^2Q_2\psi_1$，本征值仍为 λ_1^2. 但 $Q_1Q_2\psi_1=-Q_2Q_1\psi_1=-\lambda_1Q_2\psi_1$，即 $Q_2\psi_1$ 是 Q_1 本征态，本征值为 $-\lambda_1$. 这样，我们找到了 $\hat{H}_s$ 的两个本征态，本征值为 λ_1^2，即 ψ_1 和 $Q_2\psi_1$. 此外无其它独立的本征态属于 $\hat{H}_s$ 的本征值 λ_1^2. 所以能级为二重简并.

超对称谐振子 $\hat{H}_s$ 可以表示成

$$\begin{aligned}
\hat{H}_s &= \{Q,Q^\dagger\} = Q_1^2 = (Q+Q^\dagger)^2 \\
&= (a\psi^\dagger + a^\dagger\psi)(a\psi^\dagger + a^\dagger\psi) \\
&= aa^\dagger\psi^\dagger\psi + a^\dagger a\psi\psi^\dagger \\
&= (aa^\dagger - a^\dagger a)\psi^\dagger\psi + a^\dagger a(\psi^\dagger\psi + \psi\psi^\dagger) \\
&= \psi^\dagger\psi + a^\dagger a \\
&= (a^\dagger a + 1/2) + (\psi^\dagger\psi - 1/2).
\end{aligned} \tag{16}$$

能量本征值为 $E_{n_Bn_F}=(n_B+1/2)+(n_F-1/2)$，$n_B=0,1,2,\cdots$；$n_F=0,1$. (17)

例 电子的 Landau 能级

均匀磁场 $\boldsymbol{B}$（沿 z 轴方向）中的电子，不计及自旋自由度及其内禀磁矩时，能级为（参阅 §2.1）

$$E_n=(n+1/2)\hbar\omega_c,\ \omega_c=eB/mc,\ n=0,1,2,\cdots. \tag{18}$$

当计及电子内禀磁矩与外磁场相互作用 $-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=\frac{e}{mc}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{B}$ 后 $\left(\boldsymbol{\mu}=-\frac{e}{mc}\boldsymbol{s}=-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\right)$，增加一项能量$\frac{eB}{mc}m_s$（$m_s=\pm1/2$），所以能

[12] 曾谨言. 量子力学 卷 I. 北京：科学出版社，1997. 215.

级公式化为

$$E_{nm_s}=(n+m_s+1/2),n=0,1,2,\cdots;m_s=\pm 1/2. \quad (19)$$

不妨把 m_s 态记为费米子数 $n_F=m_s+1/2$ 的态，$n_F=0,1$，而 $n=n_B$ 表示玻色子数，则上式化为

$$E_{n_Bn_F}=[(n_B+1/2)+(n_F-1/2)]\hbar\omega_c,$$

$$n_B=0,1,2,\cdots;n_F=0,1. \quad (20)$$

能谱形式如图 4.2。基态($n_B=n_F=0$)能量为 0，不简并而激发态是二重简并的.

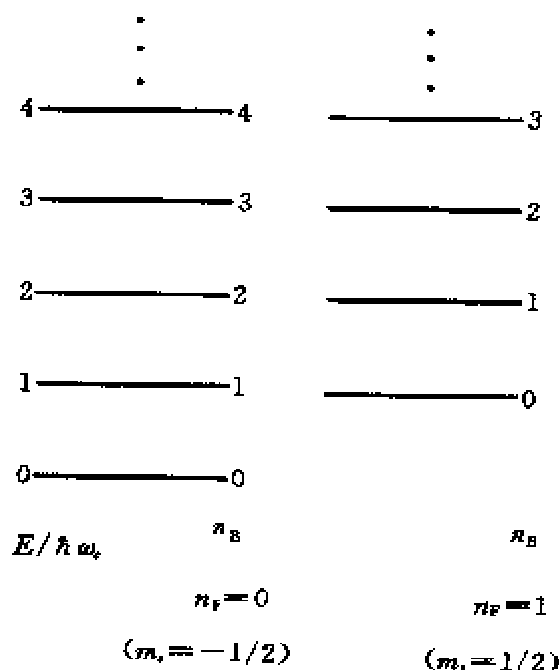


图 4.2

$\hat{H}_s$(见(16)式)还可以写成

$$\hat{H}_s=\{Q,Q^\dagger\}=\{a\psi^\dagger,a^\dagger\psi\}$$

$$=aa^\dagger\psi^\dagger\psi+a^\dagger a\psi\psi^\dagger$$

$$=\frac{1}{2}([a,a^\dagger]+\{a,a^\dagger\})\psi^\dagger\psi+\frac{1}{2}([a^\dagger,a]+\{a^\dagger,a\})\psi\psi^\dagger$$

$$=\frac{1}{2}[a,a^\dagger](\psi^\dagger\psi-\psi\psi^\dagger)+\frac{1}{2}\{a,a^\dagger\}(\psi^\dagger\psi+\psi\psi^\dagger)$$

$$=\frac{1}{2}\{a,a^{\dagger}\}-\frac{1}{2}[a,a^{\dagger}]\sigma_3 \tag{21}$$

可见只当$[a,a^{\dagger}]\neq 0$的情况，$\hat{H}_s$中才出现费米子自由度. 对于超对称谐振子$[a,a^{\dagger}]=1$，所以 $\hat{H}_s=\frac{1}{2}\{a,a^{\dagger}\}-\frac{1}{2}\sigma_3=a^{\dagger}a+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\sigma_3=\begin{pmatrix}a^{\dagger}a, & 0\\ 0 & a^{\dagger}a+1\end{pmatrix}$.

超对称谐振子能谱的二重简并，反映了 $\hat{H}_s$ 在超对称变换 $e^{-i\alpha Q_2}=e^{+\alpha(Q-Q^{\dagger})}$下的不变性. 在此变换下，算符 F 变化如下.

$$F\to F'=e^{-\alpha(Q-Q^{\dagger})}Fe^{+\alpha(Q-Q^{\dagger})}. \tag{22}$$

对于无穷小变换 $\alpha=\varepsilon\to 0$,

$$\delta F=F'-F=-[\varepsilon(Q-Q^{\dagger}),F]=[\varepsilon(a^{\dagger}\psi-a\psi^{\dagger}),F]. \tag{23}$$

显然

$$\delta a^{\dagger}=[\varepsilon(a^{\dagger}\psi-a\psi^{\dagger}),a^{\dagger}]=-\varepsilon[a,a^{\dagger}]\psi^{\dagger}=-\varepsilon\psi^{\dagger} \tag{24}$$

$$\delta a=-\varepsilon\psi, \tag{25}$$

但

$$\begin{aligned}\delta\psi^{\dagger}&=[\varepsilon(a^{\dagger}\psi-a\psi^{\dagger}),\psi^{\dagger}]\\&=\varepsilon a^{\dagger}\psi\psi^{\dagger}-\varepsilon a\psi^{\dagger}\psi^{\dagger}-\psi^{\dagger}\varepsilon a^{\dagger}\psi+\psi^{\dagger}\varepsilon a\psi^{\dagger}\\&=a^{\dagger}\varepsilon\psi\psi^{\dagger}-a^{\dagger}\psi^{\dagger}\varepsilon\psi\end{aligned} \tag{26}$$

为保证 $\hat{H}_s$ 的不变性，要求 ε 为反对易 C 数[注]，即

〔注〕 满足下列与费米子算符反对易关系的数 C(不是量子力学中的算符)

$\{C,\psi\}=0,\{C,\psi^{\dagger}\}=0,C^2=0$,就称为反对易 C 数. 只当变换参数 α(包括无穷小数 ε)为反对易 C 数，算子 ψ 和 $\psi^{\dagger}$ 才能保持为费米子算符，因为 $\psi\to\psi'=\psi+\delta\psi,\psi'\psi'=(\psi-\varepsilon a)(\psi-\varepsilon a)=\psi\psi-\varepsilon a\psi-\psi\varepsilon a+\varepsilon^2a^2=-a(\varepsilon\psi+\psi\varepsilon)=0$ 才能成立. 在更一般超对称理论中，还会同时出现几种反对易 C 数ε_i，它们之间还要求满足$\{\varepsilon_i,\varepsilon_j\}=0$. 这种代数称为 Grassmann 代数.

$$\epsilon\psi = -\psi\epsilon, \epsilon\psi^{\dagger} = -\psi^{\dagger}\epsilon, \tag{27}$$

此时

$$\delta\psi^{\dagger} = \epsilon a^{\dagger}(\psi\psi^{\dagger} + \psi^{\dagger}\psi) = \epsilon a^{\dagger}. \tag{28}$$

类似有

$$\delta\psi = -\epsilon a. \tag{29}$$

这样

$$\begin{aligned} \delta\hat{H}_s &= \delta(a^{\dagger}a + \psi^{\dagger}\psi) \\ &= (\delta a^{\dagger})a + a^{\dagger}\delta a + (\delta\psi^{\dagger})\psi + \psi^{\dagger}(\delta\psi) \\ &= -\epsilon\psi^{\dagger}a - \epsilon a^{\dagger}\psi + \epsilon a^{\dagger}\psi - \psi^{\dagger}\epsilon a = 0 \end{aligned} \tag{30}$$

即 $\hat{H}_s$ 在超对称变换 $e^{\alpha(Q-Q^{\dagger})}$ 下具有不变性，变换参数 α（及无穷小量 ϵ）为反对易 C 数.

A1.2 有相互作用的超对称 Hamilton 量

超对称谐振子 Hamilton 量(16)式描述的是自由的玻色子和费米子体系，无相互作用. 如考虑玻色子相互作用，则可将 $a, a^{\dagger} \to A, A^{\dagger}$，它们是$(a, a^{\dagger})$的函数. 超对称变换定义为(参见 27 式)

$$Q = A\psi^{\dagger}, Q^{\dagger} = A^{\dagger}\psi \tag{31}$$

此时

$$Q^2 = 0, \quad Q^{\dagger 2} = 0, \tag{32}$$

仍然成立.

$$\{Q, Q^{\dagger}\} = \begin{pmatrix} A^{\dagger}A & 0 \\ 0 & AA^{\dagger} \end{pmatrix}. \tag{33}$$

类似引进厄米算符 Q_1 和 Q_2，

$$Q_1 = (Q + Q^{\dagger}), Q_2 = i(Q - Q^{\dagger}). \tag{34}$$

同样有

$$\{Q_1, Q_2\} = 0, (\text{但}[Q_1, Q_2] \neq 0), \tag{35}$$

$$Q_1^2 = Q_2^2 = \{Q, Q^{\dagger}\} = \hat{H}_s. \tag{36}$$

$\hat{H}_s$ 也可以同样表示成(参见(21)式)

$$\hat{H}_s = \frac{1}{2}\{A, A^\dagger\} - \frac{1}{2}[A, A^\dagger]\sigma_3. \tag{37}$$

只当$[A, A^\dagger] \neq 0$时，$\hat{H}_s$中才出现费米子自由度.

例如在一般势阱 $V(x)$中（见§4.2,(18)式），玻色子算子定义为（自然单位，$\hbar = m = 1$）

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + W(x), A^\dagger = -\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + W(x), \tag{38}$$

$W(x)$为超势.容易证明

$$[A, A^\dagger] = \sqrt{2}W'(x) \tag{39}$$

（对于谐振子势 $W(x) = x/\sqrt{2}$，$[A, A^\dagger] = 1$ 就是玻色子对易式.）

$$\{A, A^\dagger\} = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + 2W(x)^2 \tag{40}$$

所以

$$\hat{H}_s = -\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + W(x)^2 - \frac{1}{\sqrt{2}}W'(x)\sigma_3 \tag{41}$$

§4.2 中把谐振子的处理方法推广到一般势阱，相当于把 $a \to A$，$a^\dagger \to A^\dagger$，而

$$\hat{H}_s = \begin{pmatrix} a^\dagger a & 0 \\ 0 & aa^\dagger \end{pmatrix} \to \hat{H}_s = \begin{pmatrix} A^\dagger A & 0 \\ 0 & AA^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}_- & 0 \\ 0 & \hat{H}_+ \end{pmatrix}. \tag{42}$$

有关超对称谐振子的能谱特征是否会改变？回答是，不变.因为所有证明都只用到超对称变换 $Q, Q^\dagger$（或 Q_1, Q_2）的对易关系，不涉及 Q_1 和 Q_2 的细节.但 $\hat{H}_s$ 的零本征态是否存在？如存在，它是否简并？为此，考虑 $\hat{H}_s$ 的零本征值相应的本征态$|\phi\rangle$，

$$\hat{H}_s|\phi\rangle = 0. \tag{43}$$

令

$$|\phi\rangle = \begin{pmatrix} |\phi_-\rangle \\ |\phi_+\rangle \end{pmatrix}. \tag{44}$$

则

$$\begin{pmatrix} A^\dagger A & 0 \\ 0 & AA^\dagger \end{pmatrix}\begin{pmatrix} |\phi_-\rangle \\ |\phi_+\rangle \end{pmatrix} = 0$$

即

$$A^\dagger A|\phi_-\rangle = 0, \tag{45}$$

$$AA^\dagger|\phi_+\rangle = 0. \tag{46}$$

用$\langle\phi_-|$与(45)式取标积,得

$$\left|A|\phi_-\rangle\right|^2 = 0, \tag{47}$$

即

$$A|\phi_-\rangle = 0, \tag{48}$$

类似有

$$A^\dagger|\phi_+\rangle = 0. \tag{49}$$

在 x 表象中,上两式化为

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + W(x)\right)\phi_-(x) = 0, \tag{48'}$$

$$\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + W(x)\right)\phi_+(x) = 0. \tag{49'}$$

其解为

$$\phi_\pm(x) = \exp\left[\pm\sqrt{2}\int^x W(x')\mathrm{d}x'\right]. \tag{50}$$

为保证为束缚态,要求

$$\text{对 } \phi_-(x), \int^x W(x')\mathrm{d}x' \xrightarrow{|x|\to\infty} \infty, \tag{51}$$

$$\text{对 } \phi_+(x), \int^x W(x')\mathrm{d}x' \xrightarrow{|x|\to\infty} -\infty. \tag{52}$$

两者不可兼顾. 而只有下列两种情况是可能的:

(1) $\int^x W(x')\mathrm{d}x' \xrightarrow{|x|\to\infty} \infty$,此时 $\phi_-(x)$ 可归一化,

或 $\int^x W(x')\mathrm{d}x' \xrightarrow{|x|\to\infty} -\infty$,此时 $\phi_+(x)$ 可归一化.

两者只有一个可能实现,所以 $E=0$ 的本征态只有一个,是不简并的.

(2) $|x|\to\infty$ 时 $\int^x W(x')\mathrm{d}x'$ 既不趋于 ∞,也不趋于 $-\infty$,此时 $\phi_\pm(x)$ 都不能归一化,因而不存在 $E=0$ 的束缚态。换言之,是否存在 $E=0$ 束缚态,取决于 $\int^x W(x')\mathrm{d}x'$ 在 $|x|\to\infty$ 的渐近行为. 对于谐振子势 $W(x)=x/\sqrt{2}$, $\sqrt{2}\int^x W(x')\mathrm{d}x' = x^2/2 \longrightarrow \infty$ (当 $|x|\to\infty$ 时),所以 $\phi_-(x)\sim e^{-x^2/2}$ 可归一化,而 $\phi_+(x)$ 不是束缚态.

附录 2 $V(x)=-V_0\mathrm{sech}^2\beta x$ 势阱中粒子的束缚态[13]

具有反射不变性的 $V(x)$ 势阱中粒子的能量本征方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - V_0\mathrm{sech}^2\beta x\right]\psi(x) = E\psi(x). \tag{1}$$

β^{-1} 为势阱的特征长度. 以下计算束缚态能级($E<0$). 引进无量纲参数 λ

$$\lambda = \frac{1}{4}\left[\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\beta^2}+1} - 1\right]. \tag{2}$$

[13] ter Haar D. Problems in Quantum Mechanics. New York: Academic Pres, 1975. Prob. 1.14. 中译本: 王正清等译. 量子力学习题集. 北京: 高等教育出版社, 1990.

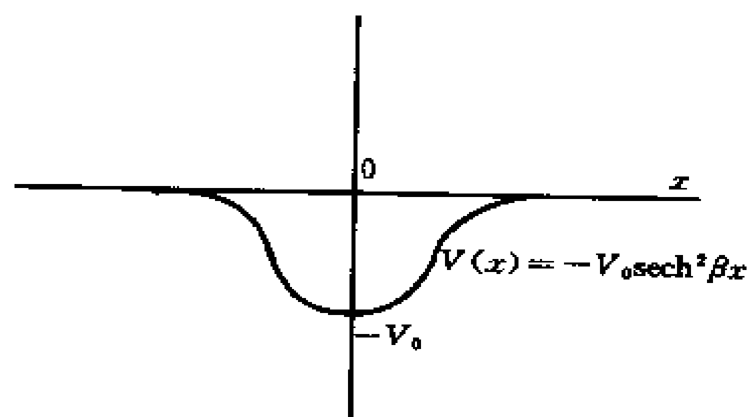


图 4.3

作函数变换,令

$$\psi = (\operatorname{sech}\beta x)^{2\lambda} u, \tag{3}$$

代入(1)式,得

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}x^2} - 4\lambda\beta\tanh\beta x\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} + 4\beta^2(\lambda^2 - \kappa^2)u = 0, \tag{4}$$

式中 κ 是与能量 E 有关的无量纲参数

$$\kappa = \sqrt{-mE/2\hbar^2\beta^2}, \left(E = -\frac{\hbar^2\beta^2}{2m}(2\kappa)^2 < 0\right). \tag{5}$$

作变量替换,令

$$z = -\operatorname{sh}^2\beta x, \tag{6}$$

则式(4)化为超几何方程

$$z(1-z)\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}z^2} + \left[\frac{1}{2} - (1-2\lambda)z\right]\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z} - (\lambda^2 - \kappa^2)u = 0. \tag{7}$$

与超几何方程的标准形式

$$z(1-z)\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}z^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)z]\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z} - \alpha\beta u = 0 \tag{8}$$

比较,相应的参数为

$$\alpha = \kappa - \lambda, \beta = -(\kappa + \lambda), \gamma = 1/2. \tag{9}$$

方程(7)的两个线性独立解(在 $z=0$ 点,即 $x=0$ 点有限)可取为

$$u_1 = F(\alpha,\beta,\gamma;z) = F(-\lambda+\kappa,-\lambda-\kappa,1/2;z), \quad (10a)$$

$$u_2 = \sqrt{|z|}F(\alpha+1/2,\beta+1/2,\gamma+1;z)$$

$$= \sqrt{|z|}F\left(-\lambda+\kappa+1/2,-\lambda-\kappa+\frac{1}{2},3/2;z\right), \quad (10b)$$

它们分别给出偶宇称和奇宇称解.根据束缚态条件,当 $x\to\pm\infty$ 处,$\psi(x)\to 0$,(10)式中的无穷级数解必须中断为一个多项式.对于(10a),则要求 $\alpha=-\lambda+\kappa$ 或 $\beta=-(\kappa+\lambda)$ 为 0 或负整数.但经过分析可以发现,从后一条件得出的波函数 $\psi(x)$ 在 $x\to\pm\infty$ 处呈指数上升,不符合束缚态要求.所以,只能是 $(\lambda-\kappa)=l$,$(l=0,1,2,\cdots)$.再考虑到(5)式,$\kappa=\lambda-l$,$\kappa^2=(\lambda-l)^2=-mE/2\hbar^2\beta^2$,可得出偶宇称态能级

$$E_l = -\frac{\hbar^2\beta^2}{2m}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\beta^2}+1}-2l-1/2\right]^2, l=0,1,2,\cdots \quad (11)$$

对于(10b)解,类似可得,只当 $\lambda-\kappa-1/2=m$,$(m=0,1,2,\cdots)$ 时,才满足束缚态条件,从而得出奇宇称态能级

$$E_m = -\frac{\hbar^2\beta^2}{2m}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\beta^2}+1}-(2m+1)-1/2\right]^2, \quad m=0,1,2,\cdots. \quad (12)$$

(11)式与(12)式可以合并,表示成

$$E_n = -\frac{\hbar^2\beta^2}{2m}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\beta^2}+1}-(n+1/2)\right]^2, \quad n=0,1,2,\cdots. \quad (13)$$

附录3　$V(x)=V_0\cot^2(\pi\eta x)$势阱中粒子的束缚态[12]

势阱

$$V(x) = V_0\cot^2(\pi\eta x) \tag{1}$$

$a=1/\eta$ 为势阱宽度. 能量本征方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_0\cot^2(\pi\eta x)\right]\psi(x) = E\psi(x). \tag{2}$$

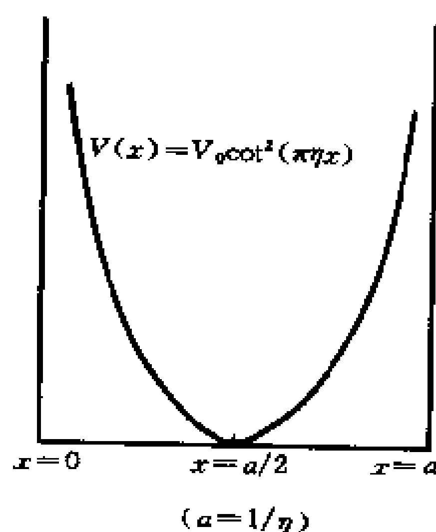


图 4.4

作函数变换,令

$$\psi = [\sin(\pi\eta x)]^{-2\lambda}u, \tag{3}$$

式中 λ 为无量纲参数

$$\lambda = \frac{1}{4}\left[\sqrt{\frac{8mV_0}{\pi^2\hbar^2\eta^2}+1}-1\right], \tag{4}$$

则 u 满足

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}-4\pi\eta\lambda\cot(\pi\eta x)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}+4\pi^2\eta^2(\nu^2-\lambda^2)u=0, \tag{5}$$

ν 为另一无量纲参数,

$$\nu = \sqrt{\frac{m}{2\pi^2\hbar^2\eta^2}(E+V_0)}. \tag{6}$$

引进新变量

$$z = \cos^2(\pi\eta x) \tag{7}$$

则(5)式化为超几何方程

$$z(1-z)\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}z^2}+\left[\frac{1}{2}-(1-2\lambda)z\right]\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}+(\nu^2-\lambda^2)u=0. \tag{8}$$

与超几何方程一般形式比较,参数

$$\alpha = -(\nu + \lambda), \beta = (\nu - \lambda), \gamma = 1/2. \tag{9}$$

方程(8)的一个解(偶函数)

$$u_1 = F(-\nu - \lambda, \nu - \lambda, 1/2; z) \tag{10a}$$

它在 $z=0$ 点(即 $x = a/2$)取不为 0 的有限值. 另一解为(奇函数)

$$u_2 = \sqrt{|z|} F(-\nu - \lambda + 1/2, \nu - \lambda + 1/2, 3/2; z) \tag{10b}$$

在 $z=0(x = a/2)$点, $u_2 \to 0$.

为利用波函数在 $z=1(x=0$ 或 $a/2)$点的束缚态条件,可利用下列公式

$$F(\alpha, \beta, \gamma; z) = (1-z)^{-\alpha} F\left(\alpha, \gamma - \beta, \gamma; \frac{z}{z-1}\right)$$

此时, u_1 和 u_2 可分别表示成

$$u_1 = (1-z)^{\nu+\lambda} F\left(-\nu - \lambda, 1/2 - \nu + \lambda, 1/2; \frac{z}{z-1}\right), \tag{11a}$$

$$u_2 = \sqrt{|z|}(1-z)^{\nu+\lambda-1/2} F\left(-\nu - \lambda + 1/2,\right.$$

$$\left. 1 - \nu + \lambda, 3/2; \frac{z}{z-1}\right). \tag{11b}$$

为保证 $z \to 1$ 时波函数趋于 0(束缚态),(11)式作为 $z/(z-1)$的幂级数必须中断为一个多项式. 这对于(11a)解,就要求$(-\nu-\lambda)$或$(-\nu+\lambda+1/2)$为 0 或负整数. 但仔细分析表明,只有第二种情况,即$(\nu-\lambda-1/2)=k$, $(k=0,1,2,\cdots)$时,所得出的波函数满足束缚态条件,因此$(\nu-\lambda)=k+1/2$, $k=0,1,2,\cdots$. 类似,对于波函数(11b),要求$(\nu-\lambda)=k+1$, $k=0,1,2,\cdots$. 概括起来,要求

$$\nu - \lambda = \frac{n}{2}, n = 1,2,3,\cdots, \tag{12}$$

即 $$\nu^2 = \left(\lambda + \frac{n}{2}\right)^2$$

代入(6)式,$(E + V_0) = 2\pi^2 \hbar^2 \eta^2 \nu^2 / m$,并利用(4)式,经过计算,可得出

$$E = E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 \eta^2}{2m}(n^2 + 4\lambda n - 2\lambda), n = 1,2,3,\cdots. \quad (13)$$

5 氢原子和各向同性谐振子的升、降算符

下面用 Schrödinger 的因式分解法和升、降算符概念来分析中心力场中粒子的各束缚态之间的升、降算符.中心力场中粒子的束缚态一般有简并.特别是具有动力学对称性的中心势,还有进一步的简并,因而有多种类型的升、降算符.

三维中心势 $V(r)$中,粒子的能量本征方程(球坐标)为

$$\hat{H}\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r + \frac{\hat{\boldsymbol{l}}^2}{2Mr^2} + V(r)\right]\psi = E\psi,$$

$\hat{\boldsymbol{l}} = \boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ 为轨道角动量算符.取 ψ 为守恒量完全集$(\hat{H},\hat{\boldsymbol{l}}^2,\hat{l}_z)$的共同本征态,即

$$\psi(r,\theta,\psi) = R_l(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{\chi_l(r)}{r}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi),$$

$$l = 0,1,2,\cdots,\quad m = 0,\pm 1,\cdots,\pm l,$$

则轨道角动量为 l 的态的径向方程为

$$\chi_l''(r) + \left[\frac{2M}{\hbar^2}(E_l - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l(r) = 0,$$

$$\chi_l(0) = 0.$$

再根据束缚态边条件,可求出角动量为 l 的能量本征值 E_{ln_r}, $n_r = 0,1,2,\cdots$, n_r 为径向量子数,表示径向波函数 $\chi_{ln_r}(r)$的节点数($r = 0,\infty$ 点除外).在§5.1,§5.2 中,将对三维和二维各向同性谐振子的径向 Schrödinger 方程进行因式分解,从而找出各束缚定态之间的四类升、降算符.在§5.3 中,我们将证明,只在各向同性谐振子势和 Coulomb 势两种情形下,径向 Schrödinger 方程可以因式分解.§5.4,§5.5 将分别讨论三维和二维氢原子的径向

Schrödinger 方程的因式分解，以求出它们的角动量 l 的升、降算符．然后利用合流超几何函数的递推关系，求出其它升、降算符．

5.1 三维各向同性谐振子

三维各向同性谐振子，$V(r)=\frac{1}{2}M\omega^2 r^2$，取自然单位（$M=\hbar=\omega=1$），则径向方程可以表示为

$$D(l)\chi_l(r)=\lambda_l\chi_l(r),\lambda_l=-2E,$$
$$D(l)\equiv\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}-r^2. \tag{1}$$

定义依赖于角动量 l 的算符[1]

$$A_+(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}+r,\quad A_-(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}-r, \tag{2}$$

$$B_+(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}-r,\quad B_-(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}+r. \tag{3}$$

直接计算可以证明，它们满足下列因式分解关系式

$$A_-(l+1)A_+(l)=D(l)+(2l+3), \tag{4a}$$

$$A_+(l-1)A_-(l)=D(l)+(2l-1), \tag{4b}$$

$$B_-(l+1)B_+(l)=D(l)-(2l+3), \tag{5a}$$

$$B_+(l-1)B_-(l)=D(l)-(2l-1). \tag{5b}$$

利用(4)，(5)及(1)式，不难证明（见下页[注]）

$$D(l)[A_+(l-1)\chi_{l-1}]=(\lambda_{l-1}+2)A_+(l-1)\chi_{l-1}, \tag{6a}$$

$$D(l)[A_-(l+1)\chi_{l+1}]=(\lambda_{l+1}-2)A_-(l+1)\chi_{l+1}, \tag{6b}$$

$$D(l)[B_+(l-1)\chi_{l-1}]=(\lambda_{l-1}-2)B_+(l-1)\chi_{l-1}, \tag{7a}$$

$$D(l)[B_-(l+1)\chi_{l+1}]=(\lambda_{l+1}+2)B_-(l+1)\chi_{l+1}. \tag{7b}$$

---

[1] 刘宇峰，曾谨言．物理学报，1997，**46**：417．Liu Y F，Lei Y A，Zeng J Y，Phys. Lett．1997，A231：9．

由(6a)式可以看出，如 χ_{l-1}是 $D(l-1)$的本征态，本征值为 λ_{l-1}，则 $A_+(l-1)\chi_{l-1}$是 $D(l)$的本征态，本征值为$(\lambda_{l-1}+2)$，即 D 的本征值增加 2，相应的能量本征值(见(1)式，$E=-\lambda_l/2$)减小 1．所以，算符 A_+ 的作用是使量子态的角动量增加 $1(\hbar)$，并使能量减小 $1(\hbar\omega)$．类似，从(6b)式可以看出，算符 A_- 的作用是使角动量减小 1，并使能量增加 1．同样，从(7)式可以看出，算符 $B_+(B_-)$的作用是使角动量增(减)1，同时也使能量增(减)1．为了更清楚地标明 $A_\pm$和 $B_\pm$的这种作用，可以把它们改记为

$$
\begin{aligned}
A_+(l) &\to A(l\uparrow, N\downarrow) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l+1}{r} + r,\\
A_-(l) &\to A(l\downarrow, N\uparrow) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{l}{r} - r,
\end{aligned}
\tag{8}
$$

$$
\begin{aligned}
B_+(l) &\to B(l\uparrow, N\uparrow) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l+1}{r} - r,\\
B_-(l) &\to B(l\downarrow, N\downarrow) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{l}{r} + r,
\end{aligned}
\tag{9}
$$

［注］ 用 $A_+(l)$作用于(4a)，利用(1)式，得

$$
\begin{aligned}
A_+(l)A_-(l+1)A_+(l)\chi_l &= A_+(l)[D(l)+(2l+3)]\chi_l\\
&= (\lambda_l+2l+3)A_+(l)\chi_l.
\end{aligned}
$$

把 $l\to l-1$，得

$$A_+(l-1)A_-(l)A_+(l-1)\chi_{l-1} = (\lambda_{l-1}+2l+1)A_+(l-1)\chi_{l-1}.$$

再利用(4b)，得 $[D(l)+(2l-1)]A_+(l-1)\chi_{l-1}=(\lambda_{l-1}+2l+1)A_+(l-1)\chi_{l-1}$，即

$$D(l)[A_+(l-1)\chi_{l-1}] = (\lambda_{l-1}+2)[A_+(l-1)\chi_{l-1}].$$

此即(6a)式．类似，把 $A_-(l)$作用于(4b)，得

$$
\begin{aligned}
A_-(l)A_+(l-1)A_-(l)\chi_l &= A_-(l)[D(l)+(2l-1)]\chi_l\\
&= (\lambda_l+2l-1)A_-(l)\chi_l.
\end{aligned}
$$

把 $l\to l+1$，得 $A_-(l+1)A_+(l)A_-(l+1)\chi_{l+1}=(\lambda_{l+1}+2l+1)A_-(l+1)\chi_{l+1}$.

再利用(4a)式，可得

$$[D(l)+(2l+3)]A_-(l+1)\chi_{l+1} = (\lambda_{l+1}+2l+1)A_-(l+1)\chi_{l+1}.$$

即

$$D(l)[A_-(l+1)\chi_{l+1}] = (\lambda_{l+1}-2)[A_-(l+1)\chi_{l+1}].$$

此即(6b)式．

式中 N 是标记能量的量子数(附录 1, $E = E_N = N + 3/2$, $N = l + 2n_r$, $n_r = 0,1,2,\cdots$; $N = 0,1,2,\cdots$.)见图 5.1(a).

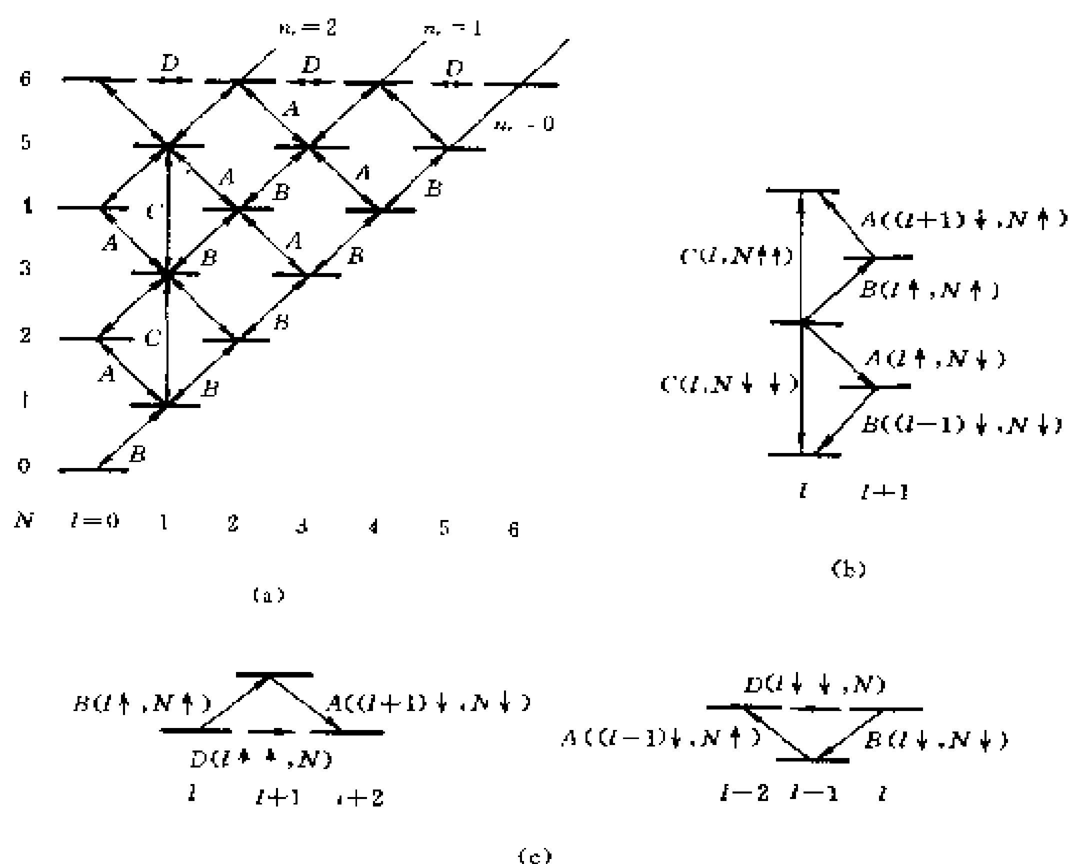


图 5.1 (a)三维各向同性谐振子能级与四类升、降算符,
(b) C 算符的构成,
(c) D 算符的构成.

根据算符 A 和 B 的物理意义,可以构造出另外两类升、降算符 C 和 D(见图 5.1,(b)和(c)).利用(8),(9)和(1)式,可以证明

$$A((l+1)\downarrow, N\uparrow)B(l\uparrow, N\uparrow) = D(l) - 2r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + 2r^2 - 1, \tag{10}$$

$$B((l+1)\downarrow, N\downarrow)A(l\uparrow, N\downarrow) = D(l) + 2r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + 2r^2 + 1.$$

(10)式作用于能量本征态 $|lN\rangle$ 上,得

$$A((l+1)\downarrow, N\uparrow)B(l\uparrow, N\uparrow)|lN\rangle =$$

$$-2\left(r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-r^2+N+2\right)|lN\rangle,$$

$$B((l+1)\downarrow,N\downarrow)A(l\uparrow,N\downarrow)|lN\rangle= \tag{11}$$

$$2\left(r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+r^2-N-1\right)|lN\rangle.$$

按照 A 和 B 的物理意义,算符 $A((l+1)\downarrow,N\uparrow)B(l\uparrow,N\uparrow)$的作用是使能量($N$)增大 2,但角动量 l 保持不变.类似,算符 $B((l+1)\downarrow,N\downarrow)A(l\uparrow,N\downarrow)$的作用是使 N 减小 2,但保持 l 不变.这样,我们就得出了下列一类算符(常数因子是无关紧要的).

$$\begin{aligned}
C(l,N\uparrow\uparrow)&=r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-r^2+(N+2),\\
C(l,N\downarrow\downarrow)&=r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+r^2-(N+1).
\end{aligned} \tag{12}$$

类似,可以证明,

$$\begin{aligned}
&A((l-1)\downarrow,N\uparrow)B(l\downarrow,N\downarrow)=\\
&\quad D(l)+\frac{2l-1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l(2l-1)}{r^2},\\
&A((l+1)\uparrow,N\downarrow)B(l\uparrow,N\uparrow)=\\
&\quad D(l)-\frac{2l+3}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{(l+1)(2l+3)}{r^2}.
\end{aligned} \tag{13}$$

(13)式作用于$|lN\rangle$上,得

$$\begin{aligned}
&A((l-1)\downarrow,N\uparrow)B(l\downarrow,N\downarrow)|lN\rangle=\\
&\quad(2l-1)\left[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r^2}-\frac{2N+3}{2l-1}\right]|l,N\rangle,\\
&A((l+1)\uparrow,N\downarrow)B(l\uparrow,N\uparrow)|lN\rangle=\\
&\quad-(2l+3)\left[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r^2}+\frac{2N+3}{2l+3}\right]|lN\rangle.
\end{aligned} \tag{14}$$

根据算符 A 和 B 的物理意义,$A((l-1)\downarrow,N\uparrow)B(l\downarrow,N\downarrow)$的作用是使角动量 l 减小 2,但保持能量(N)不变,而 $A((l+1)\uparrow,N\downarrow)B(l\uparrow,N\uparrow)$的作用是使 l 增大 2,但保持能量不变.这样,我们就找到了另一类升、降算符 D,

$$D(l\downarrow\downarrow,N)=\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r^2}-\frac{2N+3}{2l-1}\right),$$
$$D(l\uparrow\uparrow,N)=\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r^2}+\frac{2N+3}{2l+3}\right). \tag{15}$$

这样,我们已找出了三维各向同性谐振子的四类升、降算符 A、B、C 和 D.应该提到,根据径向方程的合流超几何函数解的递推关系,也可以导出 C 和 D 的表示式(12)和(15),详见附录 1.

最后,我们把四类升、降算符的表示式归纳在表 5.1(a)中.表 5.1(b)则给出相应的选择定则和守恒量子数.

表 5.1　三维各向同性谐振子的升、降算符

(a)

$A(l\uparrow,N\downarrow)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}+r$,　$A(l\downarrow,N\uparrow)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}-r$,

$B(l\uparrow,N\uparrow)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}-r$,　$B(l\downarrow,N\downarrow)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}+r$,

$C(l,N\downarrow\downarrow)=r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+r^2-N-1$,　$C(l,N\uparrow\uparrow)=r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-r^2+N+2$, $(N=l+2n_r)$

$D(l\uparrow\uparrow,N)=\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r^2}+\frac{2N+3}{2l+3}$,　$D(l\downarrow\downarrow,N)=\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r^2}-\frac{2N+3}{2l-1}$.

(b)

	l	n_r	$N=l+2n_r$	守恒量子数
$A(l\uparrow,N\downarrow)$	$l\to l+1$	$n_r\to n_r-1$	$N\to N-1$	$l+n_r$, $(N-n_r)$
$A(l\downarrow,N\uparrow)$	$l\to l-1$	$n_r\to n_r+1$	$N\to N+1$	
$B(l\uparrow,N\uparrow)$	$l\to l+1$	$n_r\to n_r$	$N\to N+1$	n_r
$B(l\downarrow,N\downarrow)$	$l\to l-1$	$n_r\to n_r$	$N\to N-1$	
$C(l,N\uparrow\uparrow)$	$l\to l$	$n_r\to n_r+1$	$N\to N+2$	l
$C(l,N\downarrow\downarrow)$	$l\to l$	$n_r\to n_r-1$	$N\to N-2$	
$D(l\uparrow\uparrow,N)$	$l\to l+2$	$n_r\to n_r-1$	$N\to N$	$N=l+2n_r$
$D(l\downarrow\downarrow,N)$	$l\to l-2$	$n_r\to n_r+1$	$N\to N$	

考虑到 n_r 的极小值为 0 以及算符 $A_+(l)=A(l\uparrow, N\downarrow)$ 的作用(参见表 5.1(b)及图 5.1),可知 $A_+(l)\chi_{l,n_r=0}=0$,即

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}+r\right)\chi_{l0}(r)=0. \tag{16}$$

解之,得

$$\chi_{l0}(r)\sim r^{l+1}\mathrm{e}^{-r^2/2},(l=0,1,2,\cdots). \tag{17}$$

用 $A((l+1)\downarrow, N\uparrow)$ 对(16)式运算,利用(4a)式,可得

$$[D(l)+(2l+3)]\chi_{l0}=[\lambda_{l0}+(2l+3)]\chi_{l0}=0.$$

所以 $\lambda_{l0}=-(2l+3)$,即能量为

$$E_{l,n_r=0}=(l+3/2),(l=0,1,2,\cdots). \tag{18}$$

这是 $E_N=(N+3/2)$, $N=l+2n_r$ 的特殊情况($n_r=0, N=l$).从 χ_{l0} 出发,依次用 $A(l\downarrow, N\uparrow)$, $A((l-1)\downarrow, N\uparrow)$, $\cdots$ 作用,可得出 $\chi_{l-1,1}$, $\chi_{l-2,2}$, $\cdots$, χ_{0l}, $(l=1,2,\cdots)$.这样即可求出所有径向波函数.

附　录　1

三维各向同性谐振子的径向方程为

$$\begin{aligned}&\chi_l''-\left[\frac{l(l+1)}{r^2}+r^2\right]\chi_l=\lambda_l\chi_l,\quad \lambda_l=-2E,\\&\chi_l(0)=0.\end{aligned} \tag{19}$$

考虑到 $r\to0$ 和 $r\to\infty$ 处波函数的渐近行为,不妨令(1)式的解表示成

$$\chi_l(r)=r^{l+1}\mathrm{e}^{-r^2/2}u(r), \tag{20}$$

则 u 满足下列方程

$$u''+\frac{2}{r}(l+1-r^2)u'-[\lambda_l+(2l+3)]u=0 \tag{21}$$

令 $\xi=r^2$,则上式化为合流超几何方程

$$\xi \frac{d^2 u}{d\xi^2} + [(l + 3/2) - \xi] \frac{du}{d\xi} - \left(\frac{\lambda_l}{4} + \frac{2l+3}{4}\right) u = 0. \quad (22)$$

满足 $\chi_l(0) = 0$ 边条件的解为合流超几何函数 $u = F(\alpha, \gamma; r^2)$,

$$\alpha = \frac{1}{4}(\lambda_l + 2l + 3), \quad \gamma = l + 3/2. \quad (23)$$

对于束缚态，要求 $F(\alpha, \gamma; r^2)$ 中断为一个多项式，即要求 $\alpha = -n_r, n_r = 0, 1, 2, \cdots$. 相应的能量本征值 $E_l = -\lambda_l/2$ 记为

$$E_{ln_r} = (2n_r + l + 3/2), \quad n_r = 0, 1, 2, \cdots. \quad (24)$$

或记为

$$E_N = (N + 3/2), \quad (\text{自然单位 } \hbar\omega) \quad (25)$$

$$N = 2n_r + l = 0, 1, 2, \cdots.$$

对给定 N, l 可以取 $l = N, N-2, \cdots, 1$(N 奇)或 0(N 偶). 由此可求出 E_N 能级的简并度为 $f_N = \frac{1}{2}(N+1)(N+2)$. 能级 E_{ln_r} 相应的径向波函数为 $R_{ln_r} = \chi_{ln_r}/r$,

$$\chi_{ln_r}(r) \sim r^{l-1} e^{-r^2/2} F(-n_r, l + 3/2; r^2). \quad (26)$$

利用合流超几何函数的微商公式和 6 个基本的递推关系[2]

(1) $\frac{d}{dx}F(\alpha, \gamma; x) = \frac{\alpha}{\gamma} F(\alpha+1, \gamma+1; x)$

(2) $(\gamma - \alpha) F(\alpha - 1, \gamma; x) - \alpha F(\alpha + 1, \gamma; x)$
$= (\gamma - 2\alpha - x) F(\alpha, \gamma; x)$

(3) $\gamma(\gamma - 1) F(\alpha, \gamma - 1; x) + (\gamma - \alpha) x F(\alpha, \gamma + 1; x)$
$= \gamma(\gamma - 1 + x) F(\alpha, \gamma; x)$

(4) $(\gamma - 1) F(\alpha, \gamma - 1; x) - \alpha F(\alpha + 1, \gamma; x)$
$= (\gamma - \alpha - 1) F(\alpha, \gamma; x)$

(5) $\gamma F(\alpha - 1, \gamma; x) + x F(\alpha, \gamma + 1; x) = \gamma F(\alpha, \gamma; x)$

---

[2] 王竹溪, 郭敦仁. 特殊函数概论. 北京: 科学出版社, 1979. 第 6 章, 330, 370.

(6) $(\gamma-\alpha)xF(\alpha,\gamma+1;x)+\alpha\gamma F(\alpha+1,\gamma;x)$
$=\gamma(\alpha+x)F(\alpha,\gamma;x)$

(7) $(\gamma-1)F(\alpha,\gamma-1;x)-(\gamma-\alpha)F(\alpha-1,\gamma;x)$
$=(\alpha-1+x)F(\alpha,\gamma;x)$

可以导出下列递推关系

(8) $\gamma F(\alpha+1,\gamma;x)-xF(\alpha+1,\gamma+1;x)=\gamma F(\alpha,\gamma;x)$

(9) $\gamma(\gamma-\alpha)F(\alpha-1,\gamma;x)-\alpha xF(\alpha+1,\gamma+1;x)$
$=\gamma(\gamma-2-x)F(\alpha,\gamma;x)$

(10) $(\gamma-\alpha)F(\alpha,\gamma+1;x)+\alpha F(\alpha+1,\gamma+1;x)$
$=\gamma F(\alpha,\gamma;x)$

(11) $\gamma(\gamma-1)F(\alpha,\gamma-1;x)-\alpha xF(\alpha+1,\gamma+1;x)$
$=\gamma(\gamma-1)F(\alpha,\gamma;x).$

利用以上公式可以证明下列公式：

$$\left[2\alpha+x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]F(\alpha,\gamma;x^2)=2\alpha F(\alpha+1,\gamma;x^2) \tag{27}$$

$$\left[2(\gamma-\alpha-x^2)+x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]F(\alpha,\gamma;x^2)=2(\gamma-\alpha)F(\alpha-1,\gamma;x^2) \tag{28}$$

$$\begin{aligned}&\left[-\frac{2\alpha}{\gamma}+\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]F(\alpha,\gamma;x^2)\\&=\frac{2\alpha(\gamma-\alpha)}{\gamma^2(\gamma+1)}x^2F(\alpha+1,\gamma+2;x^2)\end{aligned} \tag{29}$$

$$\begin{aligned}&\left[2(\gamma-1)-\frac{2(\gamma-\alpha-1)}{\gamma-2}x^2+x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]F(\alpha,\gamma;x^2)\\&=2(\gamma-1)F(\alpha-1,\gamma-2;x^2)\end{aligned} \tag{30}$$

由(27)～(30)式可以求出算符 C 和 D 的表示式(12)和(15).

5.2 二维各向同性谐振子

二维中心势 $V(\rho)$中粒子的 Schrödinger 方程(平面极坐标)为

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2M}\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]+V(\rho)\right\}\psi = E\psi. \quad (1)$$

取 ψ 为守恒量完全集$\left(\hat{H}, \hat{l}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$的共同本征态,令

$$\psi = \frac{\chi_m(\rho)}{\sqrt{\rho}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}, m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \quad (2)$$

则 $\chi_m(\rho)$满足下列径向方程

$$\begin{aligned}&\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{4\rho^2}-\frac{m^2}{\rho^2}\right)+V(\rho)\right]\chi_m(\rho)\\ &=\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}-\frac{(m-1/2)(m+1/2)}{\rho^2}\right)+V(\rho)\right]\chi_m(\rho)\\ &=E\chi_m(\rho).\end{aligned} \quad (3)$$

方程中只含 m^2,与 m 的正负号无关.与三维中心力场 $V(r)$中粒子的径向方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)+V(r)\right]\chi_l(r) = E\chi_l(r) \quad (4)$$

相比,有很大的相似性.参数对应关系为

$$\begin{aligned}l(l+1) &\longleftrightarrow (m-1/2)(m+1/2)\\ &=(|m|-1/2)(|m|+1/2).\end{aligned} \quad (5)$$

因此,二维中心势中粒子的径向波函数的性质可以类比三维中心势的有关结果而得出(详见文献[3],p.300~306.).[3]

对于二维各向同性谐振子势 $V(\rho) = \frac{1}{2}M\omega^2\rho^2$,取自然单位 $\hbar = M = \omega = 1$,径向方程(3)化为[4]

$$\begin{aligned}&D(m)\chi_m(\rho) = \lambda_m\chi_m(\rho), \lambda_m = -2E,\\ &D(m) \equiv \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}-\frac{(m-1/2)(m+1/2)}{\rho^2}-\rho^2.\end{aligned} \quad (6)$$

---

[3] 曾谨言.量子力学 卷Ⅰ.北京:科学出版社,1990.

[4] 刘宇峰,曾谨言.物理学报,1997,**46**.417.

下面进行因式分解，先讨论 $m\geqslant 0$ 情况(很容易延拓到 $m\leqslant 0$ 情况).与三维各向同性谐振子类似，可定义两类升、降算符

$$A_+(m)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m+1/2}{\rho}+\rho,\quad A_-(m)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{m-1/2}{\rho}-\rho,\tag{7}$$

$$B_+(m)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m+1/2}{\rho}-\rho,\quad B_-(m)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{m-1/2}{\rho}+\rho.\tag{8}$$

不难证明[4]

$$\begin{aligned}A_-(m+1)A_+(m)&=D(m)+2(m+1),\\ A_+(m-1)A_-(m)&=D(m)+2(m-1),\end{aligned}\tag{9}$$

$$\begin{aligned}B_-(m+1)B_+(m)&=D(m)-2(m+1),\\ B_+(m-1)B_-(m)&=D(m)-2(m-1).\end{aligned}\tag{10}$$

利用(9),(10)和(6)式还可以证明

$$\begin{aligned}D(m)[A_+(m-1)\chi_{m-1}]&=(\lambda_{m-1}+2)[A_+(m-1)\chi_{m-1}],\\ D(m)[A_-(m+1)\chi_{m+1}]&=(\lambda_{m+1}-2)[A_-(m+1)\chi_{m+1}],\end{aligned}\tag{11}$$

$$\begin{aligned}D(m)[B_+(m-1)\chi_{m-1}]&=(\lambda_{m-1}-2)[B_+(m-1)\chi_{m-1}],\\ D(m)[B_-(m+1)\chi_{m+1}]&=(\lambda_{m+1}+2)[B_-(m+1)\chi_{m+1}].\end{aligned}\tag{12}$$

由(11)式可以看出，$A_+(A_-)$的作用是使磁量子数 m 增(减)1，并使能量减(增)1.类似，由(12)式可以看出，$B_+(B_-)$的作用在于使 m 增(减)1，同时也使能量增(减)1.因此，不妨把 $A_\pm$ 和 $B_\pm$ 改记为

$$\begin{aligned}A_+(m)\to A(m\uparrow,N\downarrow)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m+1/2}{\rho}+\rho,\\ A_-(m)\to A(m\downarrow,N\uparrow)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{m-1/2}{\rho}-\rho,\end{aligned}\tag{13}$$

$$B_+(m)\to B(m\uparrow,N\uparrow)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m+1/2}{\rho}-\rho,$$

$$B_{-}(m)\to B(m\downarrow,N\downarrow)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{m-1/2}{\rho}+\rho. \qquad (14)$$

式中 N 是标记能量的量子数(见附录 2, $E=E_N=(N+1)$, $N=|m|+2n_\rho$, $n_\rho=0,1,2,\cdots$是 $\chi_{mn_\rho}(\rho)$的节点数($\rho=0,\infty$点除外).

与三维各向同性谐振子相似,根据算符 A 和 B 的物理意义,可以构造出另外两类算符 C 和 D,

$$\begin{aligned} C(m,N\uparrow\uparrow)&=\rho\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\rho^2+N+2,\\ C(m,N\downarrow\downarrow)&=\rho\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\rho^2-N-1, \end{aligned} \qquad (15)$$

$$\begin{aligned} D(m\downarrow\downarrow,N)&=\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{m-1/2}{\rho^2}-\frac{2N+3}{2m-2},\\ D(m\uparrow\uparrow,N)&=\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m+1/2}{\rho^2}+\frac{2N+3}{2m+2}. \end{aligned} \qquad (16)$$

考虑到径向方程(3)或(6)中只出现$|m|$,径向波函数 $\chi_{-m,n_\rho}=\chi_{m,n_\rho}$,上述升、降算符的表示式容易延拓到 $m\leqslant 0$ 情况.此时,C 算符形式不变,而 A 与 B 算符有下列关系:

$$\begin{aligned} &A((-m)\downarrow,N\uparrow)=B(m\uparrow,N\uparrow),\\ &\text{或 } B((-m)\uparrow,N\uparrow)=A(m\downarrow,N\uparrow),\\ &A((-m)\uparrow,N\downarrow)=B(m\downarrow,N\downarrow),\\ &\text{或 } B((-m)\downarrow,N\downarrow)=A(m\uparrow,N\downarrow). \end{aligned} \qquad (17)$$

而对于算符 D,有

$$D((-m)\uparrow\uparrow,N)=D(m\downarrow\downarrow,N),(m\neq\pm1). \qquad (18)$$

对于 $m=\pm1$,考虑到 $\chi_{-1,n_\rho}=\chi_{1,n_\rho}$,可以取

$$D((-1)\uparrow\uparrow,N)=D(1\downarrow\downarrow,N)=I. \qquad (19)$$

这样,我们已找出二维各向同性谐振子的四类升、降算符 A、B、C 和 D 的表示式.它们相应的选择定则和守恒量子数,见表 5.2.二维各向同性谐振子的能级和 A、B、C、D 的图示,见图 5.2.

表 5.2

	m	n_ρ	$N=\|m\|+2n_\rho$	守恒量子数
$A(m\uparrow,N\downarrow)$	$m\to m+1$	$n_\rho\to n_\rho-1$	$N\to N-1$	$\|m\|+n_\rho$
$A(m\downarrow,N\uparrow)$	$m\to m-1$	$n_\rho\to n_\rho-1$	$N\to N+1$	$=(N-n_\rho)$
$B(m\uparrow,N\uparrow)$	$m\to m+1$	$n_\rho\to n_\rho$	$N\to N+1$	n_ρ
$B(m\downarrow,N\downarrow)$	$m\to m-1$	$n_\rho\to n_\rho$	$N\to N-1$	
$C(m,N\downarrow\downarrow)$	$m\to m$	$n_\rho\to n_\rho-1$	$N\to N-2$	m
$C(m,N\uparrow\uparrow)$	$m\to m$	$n_\rho\to n_\rho+1$	$N\to N+2$	
$D(m\uparrow\uparrow,N)$	$m\to m+2$	$n_\rho\to n_\rho-1$	$N\to N$	$N=\|m\|+2n_\rho$
$D(m\downarrow\downarrow,D)$	$m\to m-2$	$n_\rho\to n_\rho+1$	$N\to N$	

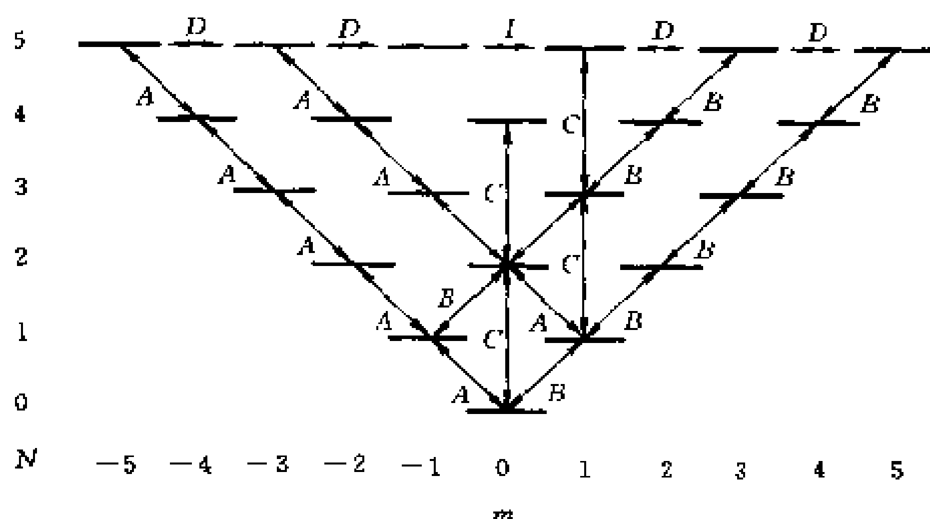


图 5.2　二维各向同性谐振子的能级和四类升、降算符

附　录　2

二维各向同性谐振子的径向方程为($\hbar=M=\omega=1$)

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{1}{4\rho^2}-\frac{m^2}{\rho^2}-\rho^2\right]\chi_m(\rho)=\lambda_m\chi_m(\rho),\lambda_m=-2E,$$

$$\chi_m(0)=0. \tag{20}$$

考虑到在 $\rho\to 0$ 和 $\rho\to\infty$ 解的渐近行为[3]，令

$$\chi_m(\rho) = \rho^{|m|+1/2} e^{-\rho^2/2} u, \tag{21}$$

则 u 满足

$$u'' + \left(\frac{2|m|+1}{\rho} - 2\rho\right)u' - (\lambda_m + 2|m| + 2)u = 0. \tag{22}$$

令 $\xi = \rho^2$，上式可化为合流超几何方程，

$$\xi \frac{d^2 u}{d\xi^2} + (|m| + 1 - \xi)\frac{du}{d\xi} - \left(\frac{|m|+1}{2} + \frac{\lambda_m}{4}\right)u = 0. \tag{23}$$

满足 $\chi_m(0) = 0$ 的解，可表示为合流超几何函数 $F(\alpha, \gamma; \rho^2)$，

$$\alpha = \frac{|m|+1}{2} + \frac{\lambda_m}{4}, \gamma = |m| + 1. \tag{24}$$

对于束缚态，要求 F 中断为一个多项式，即 $\alpha = -n_\rho, n_\rho = 0,1,2,\cdots$。所以 $\lambda_m = -2(|m|+1) - 4n_\rho$，而能量 $E = |m| + 1 + 2n_\rho$，或记为

$$E = E_N = (N+1), N = |m| + 2n_\rho = 0,1,2,\cdots. \tag{25}$$

本征函数为

$$\chi_{mn_\rho}(\rho) \sim \rho^{|m|+1/2} e^{-\rho^2/2} F(-n_\rho, |m|+1, \rho^2). \tag{26}$$

对给定能级 E_N，$|m| = N, N-2, \cdots, 1$（N 奇）或 0（N 偶），简并度为 $f_N = N + 1$。

5.3 径向 Schrödinger 方程的因式分解[5]

中心力场 $V(r)$ 中，粒子的径向 Schrödinger 方程可表示为（$\hbar = M = 1$）

$$\begin{aligned} D(l)\chi_l(r) &= \lambda_l \chi_l(r), \quad \lambda_l = -2E \\ D(l) &= \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2V(r). \end{aligned} \tag{1}$$

[5] Liu Y F, Lei Y A, Zeng J Y. Phys. Lett., 1997, A231:9.

定义与角动量 l 有关的升、降算符，

$$
\begin{aligned}
A_+(l) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l+1}{r} + f(l,r), \\
A_-(l) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{l}{r} + g(l,r),
\end{aligned} \tag{2}
$$

$f(l,r)$与 $g(l,r)$待定. 容易验证

$$
\begin{aligned}
A_-(l+1)A_+(l) = &\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + [f(l,r) + g(l+1,r)]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \\
&+ \frac{\mathrm{d}f(l,r)}{\mathrm{d}r} + [f(l,r) - g(l+1,r)]\frac{l+1}{r} \\
&+ g(l+1,r)f(l,r),
\end{aligned} \tag{3}
$$

$$
\begin{aligned}
A_+(l-1)A_-(l) = &\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + [f(l-1,r) + g(l,r)]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \\
&+ \frac{\mathrm{d}g(l,r)}{\mathrm{d}r} + [f(l-1,r) - g(l,r)]\frac{l}{r} \\
&+ f(l-1,r)g(l,r).
\end{aligned}
$$

为对径向方程(1)进行因式分解，要求

$$
\begin{aligned}
A_-(l+1)A_+(l) &= D(l) + c_1(l), \\
A_+(l-1)A_-(l) &= D(l) + c_2(l),
\end{aligned} \tag{4}
$$

c_1 和 c_2 与 r 无关，待定. 比较(3)与(4)式，可得

$$
f(l,r) = -g(l+1,r), \tag{5}
$$

$$
-2V(r) + c_1(l) = \frac{\mathrm{d}f(l,r)}{\mathrm{d}r} + 2f(l,r)\frac{l+1}{r} - f(l,r)^2, \tag{6}
$$

$$
\begin{aligned}
-2V(r) + c_2(l) = &-\frac{\mathrm{d}f(l-1,r)}{\mathrm{d}r} + 2f(l-1,r)\frac{l}{r} \\
&- f(l-1,r)^2.
\end{aligned} \tag{7}
$$

假设 $V(r)$与 l 无关. 在(7)式中把 l 换成$(l+1)$，然后与(6)式相减，可得出

$$
\frac{\mathrm{d}f(l,r)}{\mathrm{d}r} = a(l), \quad a(l) = \frac{1}{2}[c_1(l) - c_2(l+1)]. \tag{8}
$$

积分，得

$$f(l,r) = a(l)r + b(l), \tag{9}$$

$b(l)$为积分常数.把(9)式代入(6)式,可得

$$2V(r) + 2b(l)\frac{l+1}{r} - a(l)^2r^2 - 2a(l)b(l)r$$
$$= \frac{1}{2}[c_1(l) + c_2(l+1)] - 2a(l) + b(l)^2. \tag{10}$$

要求无论对什么 l 和在任意点 r 上式都成立,这意味着与 l 无关的势 $V(r)$只可能为下列三种形式之一,即

$$(\text{i})V(r) \propto 1/r, (\text{ii})V(r) \propto r^2, (\text{iii})V(r) \propto r. \tag{11}$$

现分别讨论:

(i) $V(r) \propto 1/r$.

由(10)式可看出,必须要求 $a(l) = 0, b(l) = 1/(l+1)$.此时 $V(r) = -1/r$ 即 Coulomb 势.而 $f(l,r) = b(l) = 1/(l+1)$.由(8)式,得 $c_1(l) = c_2(l+1)$.再由(10)式,得 $c_1(l) = -1/(l+1)^2$, $c_2(l) = -1/l^2, (l \neq 0)$.这样,可求得

$$\begin{aligned} A_+(l) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l+1}{r} + \frac{1}{l+1}, \\ A_-(l) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{l}{r} - \frac{1}{l}, (l \neq 0) \end{aligned} \tag{12}$$

而(4)式化为

$$\begin{aligned} A_-(l+1)A_+(l) &= D(l) - 1/(l+1)^2, \\ A_+(l-1)A_-(l) &= D(l) - 1/l^2. \end{aligned} \tag{13}$$

事实上,利用(12)式,直接计算也可得出(13)式.利用(13)式,不难证明

$$\begin{aligned} D(l)[A_+(l-1)\chi_{l-1}] &= \lambda_{l-1}A_+(l-1)\chi_{l-1}, \\ D(l)[A_-(l+1)\chi_{l+1}] &= \lambda_{l+1}A_-(l+1)\chi_{l+1}. \end{aligned} \tag{14}$$

由上式可以看出,$A_+(A_-)$的作用是使量子态的角动量 l 增(减) 1,但保持能量不变,所以 A_+ 与 A_-分别为角动量升、降算符(详见§5.4).

(ⅱ) $V(r)\propto r^2$

由(10)式可看出,要求 $b(l)=0$, $a(l)^2=$ 常数(与 l,r 均无关).选用自然单位,$a(l)^2=1$,于是 $V(r)=r^2/2$(各向同性谐振子),$a(l)=\pm 1$.

$a(l)=+1$,相应的升降算符记为 $A_{\pm}$,

$$A_+(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}+r,\quad A_-(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}-r \tag{15}$$

$a(l)=-1$,相应的升、降算子记为 $B_{\pm}$,

$$B_+(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}-r,\quad B_-(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}+r. \tag{16}$$

这已在§5.1详细讨论过了.此时,(4)式化为

$$\begin{aligned}A_-(l+1)A_+(l)&=D(l)+(2l+3),\\A_+(l-1)A_-(l)&=D(l)+(2l-1),\end{aligned}\tag{17}$$

$$\begin{aligned}B_-(l+1)B_+(l)&=D(l)-(2l+3),\\B_+(l-1)B_-(l)&=D(l)-(2l+1).\end{aligned}\tag{18}$$

利用(15),(16)式直接计算也可得出(17)和(18)式.利用(17),(18)式和(1)式,可以证明:

$$\begin{aligned}D(l)[A_+(l-1)\chi_{l-1}]&=(\lambda_{l-1}+2)A_+(l-1)\chi_{l-1},\\D(l)[A_-(l+1)\chi_{l+1}]&=(\lambda_{l+1}-2)A_-(l+1)\chi_{l+1},\end{aligned}\tag{19}$$

$$\begin{aligned}D(l)[B_+(l-1)\chi_{l-1}]&=(\lambda_{l-1}-2)B_+(l-1)\chi_{l-1},\\D(l)[B_-(l+1)\chi_{l+1}]&=(\lambda_{l+1}+2)B_-(l+1)\chi_{l+1}.\end{aligned}\tag{20}$$

由(19),(20)式可以看出,算符 $A_+(A_-)$的作用是使角动量增(减)1,同时使能量减(增)1,而算符 $B_+(B_-)$则使角动量增(减)1,同时使能量也增(减)1.利用算符 A 和 B,还可构成另外两类升、降算符 C 和 D.这已在§5.1中讨论过了.

(ⅲ) $V(r)\propto r$

由(10)式,要求 $a(l)=0$, $b(l)=0$.但此时 r 的线性项 $-2a(l)b(l)r$也同时为0,即 $V(r)=0$.因此线性势 $V(r)\propto r$ 是不

能进行因式分解的.

由此可得出如下结论:只当$V(r)$为Coulomb势或各向同性谐振子势时,径向Schrödinger方程才可因式分解,并得出角动量和能量的升、降算符.值得注意,这两种势,除具有几何对称性O_3之外,都具有一定的动力学对称性(Coulomb势的束缚态,O_4对称性,三维各向同性谐振子,SU_3对称性),以及由之产生的(除角动量之外的)新的守恒量和能级的l简并性.上述结论还使人想起经典力学中著名的Bertrand定理[6]:"只当中心力遵守平方反比律或Hooke定律时,束缚运动粒子的轨道才是闭合的".看来两者之间有更深刻的联系[7,8].

5.4 三维氢原子[9]

氢原子中的电子在Coulomb势$V(r)=-e^2/r$中运动.径向方程($\hbar=M=e=1$)可表示成

$$D(l)\chi_l(r)=\lambda_l\chi_l(r),\lambda_l=-2E$$
$$D(l)=\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2}{r}. \tag{1}$$

定义与l有关的升、降算符(参阅§5.3,式(12))

$$A_+(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}+\frac{1}{l+1},$$
$$A_-(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}-\frac{1}{l},(l>0). \tag{2}$$

直接计算容易证明

---

〔6〕 参阅 Goldstein. H *Classical Mechanics*, 2nd. ed. Massachusetts: Addison-Wesley, Reading, 1980. 93, App *A*; Bertrand J. Comptes Rendus, 1873, **77**: 849.

〔7〕 Lai Y F, Hao W J, Zeng J Y. Phys. Rev., 1998, **A58**.

〔8〕 Wu Z B, Zeng J Y. J. Math. Phys., 1998, **39**.

〔9〕 刘宇峰,曾谨言. 物理学报,1997,**46**:471.

$$A_-(l+1)A_+(l) = D(l) - 1/(l+1)^2, \tag{3a}$$

$$A_+(l-1)A_-(l) = D(l) - 1/l^2, (l>0). \tag{3b}$$

还可以证明[注]

$$D(l)[A_+(l-1)\chi_{l-1}] = \lambda_{l-1}A_+(l-1)\chi_{l-1}, \tag{4a}$$

$$D(l)[A_-(l+1)\chi_{l+1}] = \lambda_{l+1}A_-(l+1)\chi_{l+1}. \tag{4b}$$

由(4a)式可以看出，如 χ_{l-1}是 $D(l-1)$的本征态，本征值为 λ_{l-1}，则 $A_+(l-1)\chi_{l-1}$是 $D(l)$的本征态，本征值仍为 λ_{l-1}.因此，A_+算符的作用是使角动量 l 增大 1，但保持能量不变.类似，从(4b)式可知，算符 A_- 的作用是使 l 减小 1，也保持能量不变.所以 $A_\pm$分别为角动量升、降算符.见图 5.3 所示.

求解径向方程式(1)，在束缚态条件下可求出氢原子的能量本征值为[10]

$$E = E_n = -1/2n^2, n = l + n_r + 1, n_r = 0,1,2,\cdots, \tag{5}$$

径向波函数为

$$\chi_{ln_r} \sim r^{l+1}e^{-r/(l+n_r+1)}F(-n_r, 2l+2; 2r/(l+n_r+1)), \tag{6}$$

或表示为

$$\chi_{ln} \sim \xi_n^{l+1}e^{-r/n}F(-(n-l-1), 2l+2; \xi_n), \xi_n = \frac{2r}{n}, \tag{6'}$$

n_r 为径向波函数的节点数($r=0,\infty$点除外)，n 为主量子数，能级

〔注〕 用 $A_+(l)$作用于(3a)式，利用(1)式，得

$$A_+(l)A_-(l+1)A_+(l)\chi_l = A_+(l)[D(l) - 1/(l+1)^2]\chi_l$$
$$= [\lambda_l - 1/(l+1)^2]A_+(l)\chi_l.$$

把 $l \to l-1$，得

$$A_+(l-1)A_-(l)A_+(l-1)\chi_{l-1} = (\lambda_{l-1} - 1/l^2)A_+(l-1)\chi_{l-1}.$$

再利用(3b)式，得 $[D(l) - 1/l^2]A_+(l-1)\chi_{l-1} = (\lambda_{l-1} - 1/l^2)A_+(l-1)\chi_{l-1}$，

即 $$D(l)[A_+(l-1)\chi_{l-1}] = \lambda_{l-1}[A_+(l-1)\chi_{l-1}]. \tag{4a}$$

类似可证明(4b)式.

〔10〕 曾谨言．量子力学 卷Ⅰ．北京：科学出版社，1997.273.

E_n 具有 l 简并性($l=0,1,\cdots,n-1$),简并度为 n^2.

由于算符 $A_\pm$ 不改变粒子的能量,所以可改记为

$$
\begin{aligned}
A_+(l) &\to A(l\uparrow,n)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}+\frac{1}{l+1},\\
A_-(l) &\to A(l\downarrow,n)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}-\frac{1}{l},(l>0).
\end{aligned}
\tag{7}
$$

根据径向波函数的表示式(6′)及合流超几何函数的递推关系(见附录 1 及附录 3),可以找出另外三类升、降算符的表示式:

$$
\begin{aligned}
B(l,n\uparrow) &= \left[r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{r}{n+1}+n\right]M\left(\frac{n}{n+1}\right),\\
B(l,n\downarrow) &= \left[r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{r}{n-1}-n\right]M\left(\frac{n}{n-1}\right).
\end{aligned}
\tag{8}
$$

$$
\begin{aligned}
C(l\uparrow,n\uparrow) &= \Big\{[(l+1)(n+1)+r]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{r}{n+1}-\\
&\quad \frac{(l+1)^2(n+1)}{r}+(n-l-1)\Big\}M\left(\frac{n}{n+1}\right),\\
C(l\downarrow,n\downarrow) &= \Big\{[l(n-1)+r]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{r}{n-1}+\\
&\quad \frac{l^2(n-1)}{r}-(n-l)\Big\}M\left(\frac{n}{n-1}\right),
\end{aligned}
\tag{9}
$$

$$
\begin{aligned}
D(l\downarrow,n\uparrow) &= \Big\{[l(n+1)-r]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{r}{n+1}+\\
&\quad \frac{l^2(n+1)}{r}-(n+l)\Big\}M\left(\frac{n}{n+1}\right),\\
D(l\uparrow,n\downarrow) &= \Big\{[(l+1)(n-1)-r]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{r}{n-1}-\\
&\quad \frac{(l+1)^2(n-1)}{r}+(n+l+1)\Big\}M\left(\frac{n}{n-1}\right),
\end{aligned}
\tag{10}
$$

式中算符 M 定义为

$$
M(k)f(x)=f(kx).
\tag{11}
$$

还应指出,只要知道了四类算符中任何两类的表示式,即可利用它们去构造出另外两类算符的表示式.例如,可以证明,利用(7)

和(8)式可求出 $B(l,n\downarrow)A(l\downarrow,n)$,除了一个常数因子外,即(9)式所示 $C(l\downarrow,n\downarrow)$的表示式.

氢原子的四类升、降算符的选择定则和守恒量子数,归纳于表5.3.

表 5.3

升、降算符	l	n_r	$n=l+n_r+1$	守恒量子数
$A(l\uparrow,n)$	$l\to l+1$	$n_r\to n_r-1$	$n\to n$	$\left.\right\}n,l+n_r$
$A(l\downarrow,n)$	$l\to l-1$	$n_r\to n_r+1$	$n\to n$	
$B(l,n\uparrow)$	$l\to l$	$n_r\to n_r+1$	$n\to n-1$	$\left.\right\}l$
$B(l,n\downarrow)$	$l\to l$	$n_r\to n_r-1$	$n\to n-1$	
$C(l\uparrow,n\uparrow)$	$l\to l+1$	$n_r\to n_r$	$n\to n+1$	$\left.\right\}n_r$
$C(l\downarrow,n\downarrow)$	$l\to l-1$	$n_r\to n_r$	$n\to n-1$	
$D(l\downarrow,n\uparrow)$	$l\to l-1$	$n_r\to n_r+2$	$n\to n+1$	$\left.\right\}n+l,2l+n_r$
$D(l\uparrow,n\downarrow)$	$l\to l+1$	$n_r\to n_r-2$	$n\to n-1$	

根据算符 A 的选择定则(见表5.3)以及 n_r 的极小值为0,可知 $A(l\uparrow,n)\chi_{l,n_r=0}=0$,即

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}+\frac{1}{l+1}\right)\chi_{l,0}(r)=0,$$

解之,得

$$\chi_{l,0}(r)\sim r^{l+1}\mathrm{e}^{-r/(l+1)},\tag{1}$$

这是(6)式的特例($n_r=0,l=n-r$,即圆轨道).对(12)式依次 $A(l\downarrow,n),A((l-1)\downarrow,n),\cdots$运算,可得出属于能级 $E_n(n=$ 维 $1)$的所有径向波函数 $\chi_{l-1,1},\chi_{l-2,2},\cdots,\chi_{0,l}$.变动 $l(l=1,2,3,\cdots)$就可得出全部径向波函数.

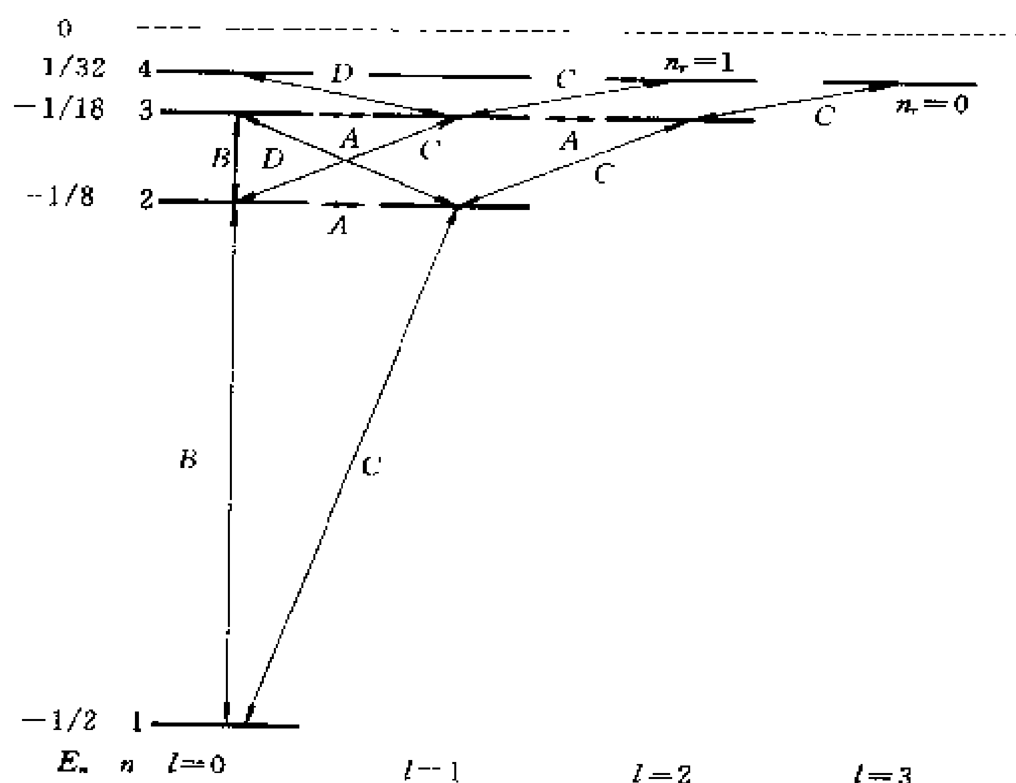


图 5.3　三维氢原子能级与四类升、降算符

附　录　3

利用合流超几何函数的递推关系式(见附录 1)可以证明

$$\left(\alpha + x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)F(\alpha,\gamma;x) = \alpha F(\alpha+1,\gamma;x), \tag{13}$$

$$\left[(\gamma-\alpha-x) + x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]F(\alpha,\gamma;x) = (\gamma-\alpha)F(\alpha-1,\gamma;x), \tag{14}$$

$$\left[(\alpha+x) - (\gamma+x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]F(\alpha,\gamma;x)$$

$$= \frac{(\gamma-\alpha)(\gamma+1-\alpha)}{\gamma(\gamma-1)}F(\alpha,\gamma+2;x), \tag{15}$$

$$\left[(\gamma-1)(\gamma-2) + \alpha x + x(\gamma+2-x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]F(\alpha,\gamma;x)$$

$$= (\gamma-1)(\gamma-2)F(\alpha,\gamma-2;x), \tag{16}$$

$$\left[-\alpha+(\gamma-x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]F(\alpha,\gamma;x)$$

$$= \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)}xF(\alpha+2,\gamma+2;x), \tag{17}$$

$$\left[(\alpha-1)x+(\gamma-1-x)(\gamma-2-x)+(\gamma-2-x)x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]$$

$$F(\alpha,\gamma;x) = (\gamma-1)(\gamma-2)F(\alpha-2,\gamma-2;x). \tag{18}$$

利用径向波函数表示式(6′)及(13)—(18)诸式,即可求出升、降算符 B,C 和 D 的表示式(8)—(10).

5.5 二维氢原子[7]

二维氢原子($V(\rho) = -e^2/\rho$)的能量本征态可取为守恒量完全集$\left(\hat{H},\hat{l}_z = -\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)$的共同本征态,令

$$\psi = \frac{\chi_m(\rho)}{\sqrt{\rho}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}, m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{1}$$

$\chi_m(\rho)$满足径向方程

$$D(m)\chi_m(\rho) = \lambda_m\chi_m(\rho), \lambda_m = -2E, \tag{2}$$

$$D(m) = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{1}{4\rho^2} - \frac{m^2}{\rho^2} - \frac{2}{\rho}$$

$$= \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} - \frac{(|m|-1/2)(|m|+1/2)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho}.$$

它与三维氢原子的径向方程很相似(参见§5.4,(1)式).利用三维氢原子的有关计算结果(形式上把 $l(l+1)\to(|m|-1/2)(|m|+1/2)$),容易给出二维氢原子的有关公式.当然,直接从径向方程(1)出发,也可得出同样的公式.二维氢原子的四类升、降算符的表示式($m\geqslant 0$ 情况)如下:

$$A(m\uparrow,n) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} + \frac{m+1/2}{\rho} + \frac{1}{m+1/2},$$

$$A(m\downarrow,n)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m-1/2}{\rho}-\frac{1}{m-1/2},\tag{3}$$

$$\begin{aligned}B(m,n\uparrow)&=\left[\rho\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{\rho}{n+1}+n\right]M\left(\frac{n}{n+1}\right),\\B(m,n\downarrow)&=\left[\rho\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{\rho}{n-1}-n\right]M\left(\frac{n}{n-1}\right),\end{aligned}\tag{4}$$

$$\begin{aligned}C(m\uparrow,n\uparrow)=&\left\{[(m+1/2)(n+1)+\rho]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{\rho}{n+1}\right.\\&\left.-\frac{(m+1/2)^2(n+1)}{\rho}+n-m-1/2\right\}M\left(\frac{n}{n+1}\right),\\C(m\downarrow,n\downarrow)=&\left\{[(m-1/2)(n-1)+\rho]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{\rho}{n-1}\right.\\&\left.+\frac{(m-1/2)^2(n-1)}{\rho}-n+m-1/2\right\}M\left(\frac{n}{n-1}\right),\end{aligned}\tag{5}$$

$$\begin{aligned}D(m\downarrow,n\uparrow)=&\left\{[(m-1/2)(n+1)-\rho]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{\rho}{n+1}\right.\\&\left.+\frac{(m-1/2)^2(n+1)}{\rho}-n-m+1/2\right\}M\left(\frac{n}{n+1}\right),\\D(m\uparrow,n\downarrow)=&\left\{[(m+1/2)(n-1)-\rho]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{\rho}{n-1}\right.\\&\left.-\frac{(m+1/2)^2(n-1)}{\rho}+n+m+1/2\right\}M\left(\frac{n}{n-1}\right).\end{aligned}\tag{6}$$

考虑到径向方程(2)中只含 m 的绝对值,所以 $\chi_{-m,n}=\chi_{m,n}$,上列公式容易推广到 $m\leqslant0$ 情况.此时,算符 B 的表示式不变.算符 A 满足下列关系式

$$\begin{aligned}A((-m)\uparrow,n)&=A(m\downarrow,n),\\A((-m)\downarrow,n)&=A(m\uparrow,n).\end{aligned}\tag{7}$$

而算符 C 和 D 变化如下:

$$\begin{aligned}C((-m)\uparrow,n\uparrow)&=-D(m\downarrow,n\uparrow),\\C((-m)\downarrow,n\downarrow)&=-D(m\uparrow,n\downarrow),\\D((-m)\downarrow,n\uparrow)&=-C(m\uparrow,n\uparrow),\end{aligned}\tag{8}$$

$$D((-m)\uparrow, n\downarrow) = -C(m\downarrow, n\downarrow). \tag{9}$$

算符 A、B、C、D 的选择定则及守恒量子数,归纳于表 5.4 中.图 5.4 给出了二维各向同性谐振子的能级及四类升、降算符的图示.

表 5.4

升、降算符	m	n_ρ	$n=\|m\|+n_\rho+1/2$	守恒量子数
$A(m\uparrow, n)$ $A(m\downarrow, n)$	$m\to m+1$ $m\to m-1$	$n_\rho\to n_\rho-1$ $n_\rho\to n_\rho+1$	$n\to n$ $n\to n$	$n, \|m\|+n_\rho$
$B(m, n\uparrow)$ $B(m, n\downarrow)$	$m\to m$ $m\to m$	$n_\rho\to n_\rho+1$ $n_\rho\to n_\rho-1$	$n\to n+1$ $n\to n-1$	m
$C(m\uparrow, n\uparrow)$ $C(m\downarrow, n\downarrow)$	$m\to m+1$ $m\to m-1$	$n_\rho\to n_\rho$ $n_\rho\to n_\rho$	$n\to n+1$ $n\to n-1$	n_ρ
$D(m\downarrow, n\uparrow)$ $D(m\uparrow, n\downarrow)$	$m\to m-1$ $m\to m+1$	$n_\rho\to n_\rho+2$ $n_\rho\to n_\rho-2$	$n\to n+1$ $n\to n-1$	$n+\|m\|, 2\|m\|+n_\rho$

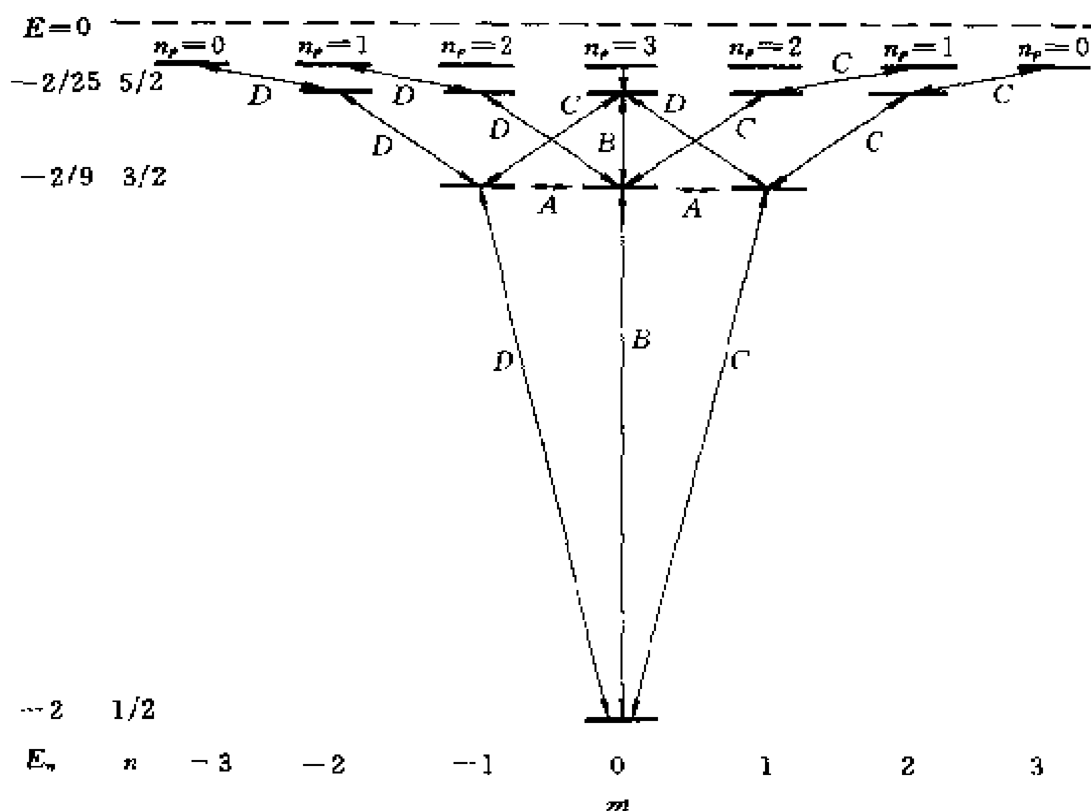


图 5.4 二维氢原子能级与四类升、降算符

附　录　4

二维氢原子（$V(\rho)=-e^2/\rho$）的径向方程（$\hbar=M=e=1$）为

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2}-\frac{m^2-1/4}{\rho^2}+\frac{2}{\rho}\right)\chi_m(\rho)=\lambda_m\chi_m(\rho),\lambda_m=-2E,\quad(10)$$

$$\chi_m(0)=0$$

考虑到 $\rho\to0$ 与 $\rho\to\infty$ 处 $\chi_m(\rho)$ 的渐近行为，对于束缚态（$E<0$），可以令

$$\chi_m(\rho)=\rho^{|m|+1/2}e^{-\sqrt{\lambda_m}\rho}u,\quad(11)$$

则 u 满足

$$\rho u''+(2|m|+1-2\sqrt{\lambda_m}\rho)u'-[(2|m|+1)\sqrt{\lambda_m}-2]u=0.\quad(12)$$

令　$\xi=2\sqrt{\lambda_m}\rho$，则上式化为合流超几何方程，

$$\xi\frac{d^2u}{d\xi^2}+(2|m|+1-\xi)\frac{du}{d\xi}-[|m|+1/2-1/\sqrt{\lambda_m}]u=0.\quad(13)$$

它在 $\rho\sim0$ 邻域有界的解为 $u=F(\alpha,\gamma;\xi)$，

$$\alpha=|m|+1/2-1/\sqrt{\lambda_m},\gamma=2|m|+1.\quad(14)$$

为保证束缚态边条件，$F(\alpha,\gamma;\xi)$ 必须中断为一多项式，即要求 $\alpha=-n_\rho,n_\rho=0,1,2,\cdots$，亦即 $\sqrt{\lambda_m}=(|m|+n_\rho+1/2)^{-1}$。所以能量本征值为

$$E=E_n=-1/2n^2,n=|m|+n_\rho+1/2=1/2,3/2,5/2,\cdots.\quad(15)$$

径向波函数为

$$\chi_{|m|n_\rho}=\rho^{|m|+1/2}e^{-\rho/n}F(-n_\rho,2|m|+1;2\rho/n).\quad(16)$$

能级 E_n 的简并度为 $f_n=2n=1,3,5,\cdots$.

6 谐振子的相干态

相干态的研究最早要追溯到 Schrödinger1926 年的工作[1].他发现谐振子存在这样一种状态,它展现出的运动性质与经典振子很相似.在此状态下,谐振子的能量平均值(零点能除外)与经典振子能量相同,而坐标和动量的平均值(即波包中心的位置和动量)随时间的演化也与经典振子完全相同,并且波包不扩散,$\Delta x\Delta p=\hbar/2$(取极小值).Schrödinger 最初研究这个问题的意图是想探讨量子力学与经典力学更深刻的联系.他在给 Planck 的信中[2]提到:他的目的是要找寻局限于空间一个小区域中的不扩散的波包,它在任意长的时间内的运动与经典粒子完全相同.对于谐振子,这种状态他已找到了,就是后来人们称之为相干态(coherent state)的特殊状态.他还写道:"I believe that it is only a question of computational skill to accompanish the same thing for the electron in the hydrogen atom. The transition from microscopic characteristic oscillations to the macroscopic 'orbit' of classical mechanics will be clearly visible."然而,在类氢原子中能描述 Kepler 轨道运动的永不扩散的波包,迄今尚未找到.但近年来,随制备 Rydberg 态(高主量子数 n 的能态)实验工作的突破,这方面的工作已取得可观的进展[3].

---

[1] Schrödinger E. Naturwissenschaften, 1926, **14**: 664. 或 Collected papers on Wave Mechanics. New York: Chelsea, 1978. 41.

[2] Pzibram K. *Letters on Wave Mechanics*, ed. London: Vision, 1967. 10.

[3] 例如,参阅:Nauenberg M, Stroud C, Yeazell J. Scientific American, 1994, (6): 24.

在60年代，相干态概念被广泛应用于量子光学等领域. Glauber[4]（首先提出“相干态”这个名词），Klauder 和 Sudarshan 等[5—8]广泛地应用相干态来处理光场的相干性质和光子统计学. 在 Dirac 的经典辐射场的量子化理论中，空窨(cavity)中的电磁辐射场往往表示成简正模式(normal modes)的迭加，辐射场被看成无穷多个谐振子组成的体系，而辐射场的状态就用谐振子能量本征态上的光子数填布情况来描述，即 occupation photon number representation，(简称 number representation). 但后来发现这种表象不大适合于描述辐射场的涉及相位和振幅变量的现象，而用相干态来描述却比较方便. 相干态本身是无穷多个光子数本征态的一种特殊的相干迭加，易于展现光子之间的合作行为(cooperative behavior). 尽管相干态已经有如此广泛的应用，在一般量子力学教材中却很少提到，较系统的介绍往往只能从一些专著中去找寻. 下面为量子力学的读者给出相干态的初步的和较系统的介绍.

6.1 Schrödinger 相干态

考虑在谐振子势 $V(x) = Kx^2/2$ 中的粒子. 设初态为

$$\psi(x,0) = \psi_0(x - x_0) = \alpha^{1/2}\pi^{-1/4}e^{-\alpha^2(x-x_0)^2/2}, \tag{1}$$

$$\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}, \quad \omega = \sqrt{K/m},$$

波形与基态波函数相似，但中心不在谐振子势的平衡点($x=0$)，

---

[4] Glauber R. Phys. Rev., 1963, 131: 2769. Dewitt C et. al. *Quantum Optics and Electronics* ed. New York: Gordon & Breach, 1964.

[5] Klauder J R, Sudarshan E C G. *Fundamentals of Quantum Optics*. New York: Benjamin, 1968.

[6] Howard S, Roy S K. *Coherent states of a harmonic oscillator*. In: Am. J. Phys., 1987, 55: 1109.

[7] Klauder J R, Skagerstam B. *Coherent states*. Singapore: World Scientific, 1985.

[8] 郭光灿. 量子光学. 北京: 高等教育出版社, 1990.

而在 $x=x_0$ 点. $\alpha^{-1}=\sqrt{\hbar/m\omega}$ 为谐振子的自然长度. $\psi(x,0)$ 并非定态,而是无穷多个定态的相干叠加.可以证明[注]

$$\psi(x,0)=\psi_0(x-x_0)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{e^{-\xi_0^2/4}\xi_0^n}{\sqrt{2^n\cdot n!}}\psi_n(x), \qquad (2)$$

式中

$$\psi_n(x)=N_n e^{-\xi^2/2}H_n(\xi), \qquad (3)$$

$$N_n=[\alpha/\sqrt{\pi}\cdot 2^n\cdot n!]^{1/2},$$

〔注〕 设 $\psi(x,0)=\sum_n C_n\psi_n(x)$, 则

$$C_n=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(x)\psi(x,0)dx$$

$$=\frac{N_n\alpha^{1/2}}{\pi^{1/4}}\cdot\int_{-\infty}^{+\infty}d\xi e^{-\xi^2/2}H_n(\xi)e^{-(\xi-\xi_0)^2/2} \qquad (a)$$

为计算右侧的积分,利用 Hermite 多项式的生成函数

$$e^{-s^2+2s\xi}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(\xi)}{n!}s^n$$

可得

$$\int_{-\infty}^{+\infty}d\xi e^{-s^2+2s\xi-(\xi^2-\xi_0\xi+\xi_0^2/2)}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{s^n}{n!}\int_{-\infty}^{+\infty}d\xi H_n(\xi)e^{-(\xi^2-\xi_0\xi+\xi_0^2/2)}. \qquad (b)$$

上式左边可直接积分,得

$$\int_{-\infty}^{+\infty}d\xi\exp\left\{-[\xi^2-2\xi(s+\xi_0/2)]-s^2-\xi_0^2/2\right\}$$

$$=\exp[(s+\xi_0/2)^2-s^2-\xi_0^2/2]\cdot\int_{-\infty}^{+\infty}d\xi e^{-[\xi-(s+\xi_0/2)]^2}$$

$$=\sqrt{\pi}\exp[\xi_0 s-\xi_0^2/4]=\sqrt{\pi}e^{-\xi_0^2/4}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\xi_0 s)^n}{n!}$$

与(b)式右边比较,可得

$$\int_{-\infty}^{+\infty}d\xi H_n(\xi)e^{-(\xi^2-\xi_0\xi+\xi_0^2/2)}=\sqrt{\pi}\cdot\xi_0^n e^{-\xi_0^2/4}.$$

代入(a)式,可得

$$C_n=\xi_0^n e^{-\xi_0^2/4}/\sqrt{2^n\cdot n!}.$$

$$\xi = \alpha x, \quad \xi_0 = \alpha x_0.$$

$\psi_n(x)$是归一化的定态波函数，相应的能量本征值为 $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$.

因此，

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-\xi_0^2/4} \cdot \xi_0^n}{\sqrt{2^n \cdot n!}} \psi_n(x) e^{-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t} \tag{4}$$

经过计算可得[注]

$$\psi(x,t) = \frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/4}} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}(\xi - \xi_0 \cos\omega t)^2 - \mathrm{i}\left(\frac{1}{2}\omega t + \xi_0 \xi \cdot \sin\omega t - \frac{1}{4}\xi_0^2 \sin 2\omega t \right) \right]. \tag{5}$$

所以[9]

〔注〕

$$\psi(x,t) = e^{-i\omega t/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-\xi_0^2/4}\xi_0^n}{\sqrt{2^n \cdot n!}} N_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) e^{-in\omega t}$$

$$= \exp[-i\omega t/2 - \xi^2/2 - \xi_0^2/4] \frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/4}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) \left(\frac{1}{2}\xi_0 e^{-i\omega t} \right)^n$$

利用

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) \left(\frac{1}{2}\xi_0 e^{-i\omega t} \right)^n$$

$$= \exp\left[-\left(\frac{1}{2}\xi_0 e^{-i\omega t} \right)^2 + 2\left(\frac{1}{2}\xi_0 e^{-i\omega t} \right)\xi \right]$$

$$= \exp\left[-\frac{1}{4}\xi_0^2 e^{-2i\omega t} + e^{-i\omega t}\xi_0 \xi \right]$$

可求出

$$\psi(x,t) = \frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/4}} \exp\left[-i\frac{\omega t}{2} - \frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi_0^2}{4}(1 + e^{-2i\omega t}) + \xi_0 \xi e^{-i\omega t} \right]$$

$$= \frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/4}} \exp\left[-\frac{\xi^2}{2} - \frac{1}{2}\xi_0^2 \cos^2\omega t + \xi_0 \xi \cos\omega t - i\left(\frac{\omega t}{2} + \xi_0 \xi \sin\omega t - \frac{1}{4}\xi_0^2 \sin 2\omega t \right) \right]$$

$$= \frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/4}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\xi - \xi_0 \cos\omega t)^2 - i\left(\frac{\omega t}{2} + \xi_0 \xi \sin\omega t - \frac{1}{4}\xi_0^2 \sin 2\omega t \right) \right]$$

〔9〕 参阅：Schiff L I. *Quantum Mechanics*. 3rd. ed. New York: McGraw-Hill, 1968. 74.

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2(x - x_0\cos\omega t)^2}. \tag{6}$$

与

$$|\psi(x,0)|^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2(x-x_0)^2} \tag{7}$$

比较,可以看出,$|\psi(x,t)|^2$ 是一个振荡的 Gauss 波包,波形不变,不扩散,振荡频率与经典谐振子的自然频率 $\omega = \sqrt{K/m}$ 相同,振幅为 x_0.波包的运动图象与经典谐振子的振动极为相似.

Schrödinger 相干态(2)还可以用平移算符 $D(x_0) = e^{-ix_0\hat{p}/\hbar}$,$\left(\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)$作用于基态波函数 $\psi_0(x)$ 而得出,

$$\psi_0(x - x_0) = D(x_0)\psi_0(x) = \langle x|D(x_0)|0\rangle. \tag{8}$$

利用

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a^\dagger - a), \tag{9}$$

$a^\dagger$ 与 a 分别为声子产生和湮没算符,于是

$$\begin{aligned} &e^{-ix_0\hat{p}/\hbar} = e^{\lambda_0(a^\dagger - a)}, \\ &\lambda_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\alpha x_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\xi_0. \end{aligned} \tag{10}$$

利用代数恒等式(见本章附录,(8)式)

$$e^{A+B} = e^A \cdot e^B e^{-[A,B]/2},$$

及$[a,a^\dagger]=1$,可得

$$\begin{aligned} e^{\lambda_0(a^\dagger - a)}|0\rangle &= e^{-\lambda_0^2/2} \cdot e^{\lambda_0 a^\dagger} e^{-\lambda_0 a}|0\rangle \\ &= e^{-\lambda_0^2/2} e^{\lambda_0 a^\dagger}|0\rangle, (\text{利用 } a|0\rangle = 0) \\ &= e^{-\lambda_0^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda_0^n}{n!}(a^\dagger)^n|0\rangle \\ &= e^{-\lambda_0^2/2}\sum_{0}^{\infty}\frac{\lambda_0^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle, \end{aligned} \tag{11}$$

式中

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^{\dagger})^n|0\rangle \tag{12}$$

是谐振子的归一化的第 n 激发态. 这样,

$$\begin{aligned}\psi_0(x-x_0) &= \langle x|\mathrm{e}^{\lambda_0(a^{\dagger}-a)}|0\rangle \\ &= \mathrm{e}^{-\lambda_0^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda_0^n}{\sqrt{n!}}\psi_n(x) \\ &= \mathrm{e}^{-\xi_0^2/4}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\xi_0^n}{\sqrt{2^n\cdot n!}}\cdot\psi_n(x).\end{aligned} \tag{13}$$

此即(2)式.

在声子数表象中,谐振子相干态表示为

$$|\lambda_0\rangle = \mathrm{e}^{\lambda_0(a^{\dagger}-a)}|0\rangle, (\lambda_0 = \alpha x_0/\sqrt{2}\ \text{为实}) \tag{14}$$

利用本章附录(5)式, $[a, \mathrm{e}^{\lambda_0(a^{\dagger}-a)}] = \lambda_0\mathrm{e}^{\lambda_0(a^{\dagger}-a)}$, 可得

$$a|\lambda_0\rangle = a\mathrm{e}^{\lambda_0(a^{\dagger}-a)}|0\rangle = \lambda_0\mathrm{e}^{\lambda_0(a^{\dagger}-a)}|0\rangle = \lambda_0|\lambda_0\rangle,$$

即 $|\lambda_0\rangle$是湮没算符 a 的本征态,本征值为 λ_0,

$$a|\lambda_0\rangle = \lambda_0|\lambda_0\rangle. \tag{15}$$

我们知道,利用产生和湮没算符,谐振子的 Hamilton 量可表示为

$$\hat{H} = \left(a^{\dagger}a + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega. \tag{16}$$

考虑到$[a, \hat{H}]\neq 0$, a 的本征态(除真空态外)只能表成 $\hat{H}$ 的若干本征态的叠加,即**不是定态**. 再考虑到 $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$, 可以断定 a 的本征态只能是**无穷多**个定态的某种相干叠加. 令

$$|\lambda_0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}C_n(\lambda_0)|n\rangle, \tag{17}$$

代入(15)式,得

$$\sum_{n=1}^{\infty}C_n\sqrt{n}|n-1\rangle = \lambda_0\sum_{n=0}C_n|n\rangle.$$

左乘$\langle m-1|$,得

$$C_m\sqrt{m} = \lambda_0 C_{m-1},$$

由此可得

$$C_n = \frac{\lambda_0}{\sqrt{n}}C_{n-1} = \cdots = \frac{\lambda_0^n}{\sqrt{n!}}C_0. \tag{18}$$

再利用归一化条件 $\sum_{n=0}^{\infty}|C_n|^2 = 1$，可得

$$|C_0|^2\sum_{n=0}^{\infty}|\lambda_0|^{2n}/n! = |C_0|^2 e^{|\lambda_0|^2} = 1$$

所以

$$|C_0| = e^{-|\lambda_0|^2/2}. \tag{19}$$

取 C_0 为实数，则相干态 $|\lambda_0\rangle$ 可表示为

$$|\lambda_0\rangle = e^{-|\lambda_0|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda_0^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle. \tag{20}$$

在坐标表象中就是($\lambda_0 = \alpha x_0/\sqrt{2} = \xi_0/\sqrt{2}$)

$$\begin{aligned}\langle x|\lambda_0\rangle &= \psi_0(x - x_0)\\ &= e^{-\xi_0^2/4}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\xi_0^n}{\sqrt{2^n \cdot n!}}\psi_n(x).\end{aligned}$$

谐振子相干态的性质：

* * * * * * * * * *

1° 利用

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + i\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right), \tag{21}$$

及其逆表示式

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^+ + a), p = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}i(a^+ - a), \tag{22}$$

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(a^{+2} + a^2 + 2a^+a + 1),$$

$$p^2 = \frac{m\omega\hbar}{2}(-a^{+2} - a^2 + 2a^+a - 1).$$

因此，在相干态$|\lambda_0\rangle$之下（λ_0为实）

$$\bar{x} = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\lambda_0, \quad \bar{p} = 0$$

$$\overline{x^2} = \left(\lambda_0^2 + \frac{1}{4}\right)\frac{2\hbar}{m\omega}, \quad \overline{p^2} = \frac{1}{2}m\omega\hbar,$$

$$\frac{1}{2}m\omega^2\,\overline{x^2} = \left(\lambda_0^2 + \frac{1}{4}\right)\hbar\omega, \quad \frac{1}{2m}\overline{p^2} = \hbar\omega/4.$$

动能平均值与势能平均值之和为$(\lambda_0^2 + 1/2)\hbar\omega_0$. 直接计算 Hamilton 量平均值

$$\overline{H} = \left(\overline{a^\dagger a} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(\lambda_0^2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega,$$

所得结果相同. 此外，

$$\Delta x = [\overline{x^2} - \bar{x}^2]^{1/2} = \sqrt{\hbar/2m\omega},$$

$$\Delta p = [\overline{p^2} - \bar{p}^2]^{1/2} = \sqrt{m\omega\hbar/2} = m\omega\Delta x,$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2, \tag{23}$$

即测不准关系允许的最低限. 这是意料中的事，因为相干态的波形与基态 $\psi_0(x)$ 相同，波包又不扩散，所以与基态相同，$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$.

2° 令 $N = a^\dagger a$（声子数算符），则

$$\hat{H}^2 = \left(N^2 + N + \frac{1}{4}\right)\hbar^2\omega^2,$$

$$N^2 = a^\dagger a a^\dagger a = a^{\dagger 2}a^2 + a^\dagger a.$$

在相干态$|\lambda_0\rangle$下，（λ_0实）

$$\bar{N} = \lambda_0^2, \quad \overline{N^2} = \lambda_0^4 + \lambda_0^2,$$

$$\Delta N = [\overline{N^2} - \bar{N}^2]^{1/2} = \lambda_0,$$

$$\Delta N/\bar{N} = 1/\lambda_0, \tag{24}$$

$$\overline{H^2} = \left(\overline{N^2} + \bar{N} + \frac{1}{4}\right)\hbar^2\omega^2 = \left(\lambda_0^4 + 2\lambda_0^2 + \frac{1}{4}\right)\hbar^2\omega^2,$$

$$\Delta E = [\overline{H^2} - \overline{H}^2]^{1/2} = \lambda_0\hbar\omega,$$

$$\Delta E/\overline{H} = \frac{\lambda_0}{\lambda_0^2 + 1/2} \approx \frac{1}{\lambda_0}, (\text{当 } \lambda_0^2 \gg 1). \tag{25}$$

对于宏观谐振子，$\lambda_0 = \frac{\alpha x_0}{\sqrt{2}} \gg 1$，上式是成立的.

6.2 湮没算符的本征态，相干态表象

上节已提到，谐振子相干态可以表示成

$$|\lambda_0\rangle = e^{\lambda_0(a^\dagger - a)}|0\rangle, (\lambda_0 = \alpha x_0/\sqrt{2} \text{ 为实}) \tag{1}$$

并证明，它是声子湮没算符的本征态，本征值为 λ_0，

$$a|\lambda_0\rangle = \lambda_0|\lambda_0\rangle. \tag{2}$$

考虑到 a 并非厄米算符，其本征值可以为复数，我们不妨把它解析延拓到复 λ 平面，定义相干态 $|\lambda\rangle$ 为 a 的本征态，

$$a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, (\lambda \text{ 复}). \tag{3}$$

不难证明(利用本章附录(5)式)，$|\lambda\rangle$ 可以表示为

$$|\lambda\rangle = D(\lambda)|0\rangle = e^{\lambda a^\dagger - \lambda^* a}|0\rangle. \tag{4}$$

这个结果也可以如下得出：令

$$|\lambda\rangle = f(a^\dagger)|0\rangle \tag{5}$$

利用附录(4)式，$[a, f(a^\dagger)] = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a^\dagger}f(a^\dagger)$；及 $a|0\rangle = 0$，有

$$af(a^\dagger)|0\rangle = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}a^\dagger}|0\rangle = \lambda f(a^\dagger)|0\rangle$$

所以

$$\left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}a^\dagger} - \lambda f(a^\dagger)\right)|0\rangle = 0 \tag{6}$$

显然

$$f(a^\dagger) \sim e^{\lambda a^\dagger} \tag{7}$$

满足(6)式. 所以 $|\lambda\rangle$ 可以表成

$$|\lambda\rangle = N_\lambda e^{\lambda a^\dagger}|0\rangle$$

N_λ 为归一化常数．利用附录(8)式，$e^A e^B = e^B e^A e^{[A,B]}$，

$$\langle\lambda|\lambda\rangle = |N_\lambda|^2\langle 0|e^{\lambda^* a}e^{\lambda a^\dagger}|0\rangle = |N_\lambda|^2\langle 0|e^{\lambda a^\dagger}e^{\lambda^* a}e^{|\lambda|^2}|0\rangle$$

$$= |N_\lambda|^2 e^{|\lambda|^2}\langle 0|e^{\lambda a^\dagger}e^{\lambda^* a}|0\rangle = |N_\lambda|^2 e^{|\lambda|^2} = 1$$

所以 $|N_\lambda| = e^{-|\lambda|^2/2}$，取 N_λ 为实数，则

$$|\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2/2}e^{\lambda a^\dagger}|0\rangle$$

$$= e^{-|\lambda|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n a^{\dagger n}}{n!}|0\rangle = e^{-|\lambda|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle. \qquad (8)$$

但注意 $f(a^\dagger) = e^{\lambda a^\dagger}$ 并非幺正算符．基于(7)式，可以把 $f(a^\dagger)$ 化为幺正算符 $D(\lambda) = e^{\lambda a^\dagger - \lambda^* a}$，$D^\dagger(\lambda) = D(-\lambda)$，$D^\dagger(\lambda)D(\lambda) = 1$，定义相干态为

$$|\lambda\rangle = D(\lambda)|0\rangle = e^{\lambda a^\dagger - \lambda^* a}|0\rangle \qquad (9)$$

此即(4)式．不难验证，它满足(3)式，并且是归一化的，展开式(8)也同样适用．

* * * * * * * * *

相干态的基本性质：

1° 非正交性．

利用(8)式，

$$\langle\lambda|\mu\rangle = e^{-(|\lambda|^2+|\mu|^2)/2}\sum_{n,m}\frac{\lambda^{*n}\mu^m}{\sqrt{n!\cdot m!}}\langle n|m\rangle$$

$$= e^{-(|\lambda|^2+|\mu|^2)/2}\sum_n\frac{(\lambda^*\mu)^n}{n!} = e^{-(|\lambda|^2-|\mu|^2)/2+\lambda^*\mu} \qquad (10)$$

$$|\langle\lambda|\mu\rangle|^2 = e^{-|\lambda|^2-|\mu|^2+\lambda^*\mu+\lambda\mu^*} = e^{-|\lambda-\mu|^2}$$

当 $\mu\neq\lambda$ 时，一般 $|\langle\lambda|\mu\rangle|^2\neq 0$，即 $|\lambda\rangle$ 与 $|\mu\rangle$ 不正交．但当 $|\lambda-\mu|\gg 1$时，它们的重叠积分很小．换言之，若用复 λ 平面上一

点来描述一个相干态，则当两点距离$\gg 1$时，相应的两个相干态近似正交.

2° 完备性关系

可证明

$$\frac{1}{\pi}\int|\lambda\rangle\langle\lambda|\mathrm{d}^2\lambda = I \tag{11}$$

式中 $\mathrm{d}^2\lambda=\mathrm{d}(\mathrm{Re}\lambda)\mathrm{d}(\mathrm{Im}\lambda)$，如采用极坐标，$\lambda=|\lambda|e^{i\varphi}$，$\varphi$ 为 λ 的幅角，则 $\mathrm{d}^2\lambda=|\lambda|\mathrm{d}|\lambda|\mathrm{d}\varphi$. 证明如下：利用(8)式，

$$\begin{aligned}\int|\lambda\rangle\langle\lambda|\mathrm{d}^2\lambda &= \sum_{n,m}\frac{|n\rangle\langle m|}{\sqrt{n!m!}}\cdot\int(\lambda)^n\lambda^{*m}e^{-|\lambda|^2}\mathrm{d}^2\lambda \\ &= \sum_{n,m}\frac{|n\rangle\langle m|}{\sqrt{n!m!}}\int_0^\infty|\lambda|^{n+m+1}e^{-|\lambda|^2}\mathrm{d}|\lambda|\int_0^{2\pi}e^{i(n-m)\varphi}\mathrm{d}\varphi \\ &= 2\pi\sum_n\frac{|n\rangle\langle n|}{n!}\int_0^\infty|\lambda|^{2n+1}e^{-|\lambda|^2}\mathrm{d}|\lambda| \\ &= \pi\sum_n|n\rangle\langle n| = \pi.\end{aligned} \tag{12}$$

因此，任何一态$|\psi\rangle$均可用相干态$|\lambda\rangle$展开，

$$|\psi\rangle = \pi^{-1}\int|\lambda\rangle\langle\lambda|\psi\rangle\mathrm{d}^2\lambda \tag{13}$$

3° 超完备性

首先证明，$|\lambda\rangle$是线性不独立的. 设 m 为任意非零整数，则

$$\begin{aligned}\int\lambda^m|\lambda\rangle\mathrm{d}^2\lambda &= \sum_{n=0}^\infty\frac{|n\rangle}{\sqrt{n!}}\int_0^\infty|\lambda|^{n+m+1}e^{-|\lambda|^2/2}\mathrm{d}|\lambda|\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi e^{i(n+m)\varphi} \\ &= 0\end{aligned} \tag{14}$$

(因对任何 n 值，对$|\lambda|$的积分总是有界).

因此，任一相干态$|\mu\rangle$，总可以展开式(见(10)式)

$$|\mu\rangle = \frac{1}{\pi}\int|\lambda\rangle\langle\lambda|\mu\rangle\mathrm{d}^2\lambda = \frac{1}{\pi}\int|\lambda\rangle e^{-|\lambda|^2/2-|\mu|^2/2+\lambda^*\mu}\mathrm{d}^2\lambda. \tag{15}$$

故称相干态$\{|\lambda\rangle\}$(λ 复)，是超完备的. 所以$\{|\lambda\rangle\}$的一个子集就

可能构成一组完备基．例如，$\{|\lambda_0\rangle\}$（λ_0 实），就构成一组完备基．又例如，让 $|\lambda|=r$（固定值），$\lambda=re^{i\varphi}$（φ 可改变），即 λ 限制在复 λ 平面内的半径为 r 的圆上，则相应的相干态（见(2)式）的积分为

$$\int_0^{2\pi}|\lambda\rangle e^{-im\varphi}d\varphi \ (m \text{ 为任意非负整数})$$

$$=e^{-r^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{|m\rangle r^n}{\sqrt{n!}}\int_0^{2\pi}e^{i(n-m)\varphi}d\varphi$$

$$=2\pi r^m e^{-r^2/2}|m\rangle/\sqrt{m!}$$

所以

$$|m\rangle=(2\pi)^{-1}r^{-m}e^{r^2/2}\int_0^{2\pi}|\lambda\rangle e^{-im\varphi}d\varphi,(\lambda=re^{i\varphi}) \tag{16}$$

这说明：$|\lambda|=r$（固定）的子集合 $\{|\lambda\rangle_{|\lambda|=r}\}$ 已足以描述谐振子的所有能量本征态 $|m\rangle$（m 为非负整数）．而谐振子的任一量子态均可以用 $\{|m\rangle\}$ 展开，因而也可以用 $\{|\lambda\rangle_{|\lambda|=r}\}$ 展开．

类似，任何作用于谐振子 Hilbert 空间的算符 A，也可以在相干态表象中表示出来，

$$A=\pi^{-2}\int|\lambda\rangle\langle\lambda|A|\mu\rangle\langle\mu|d^2\lambda d^2\mu. \tag{17}$$

但由于相干态基是超完备的，所以此表示是不唯一的．利用展开式(8)，$\langle\lambda|A|\mu\rangle$ 可以用 $\langle n|A|m\rangle$ 表示出来

$$\langle\lambda|A|\mu\rangle=e^{-|\lambda|^2/2-|\mu|^2/2}\sum_{n,m=0}^{\infty}\frac{\langle n|A|m\rangle}{\sqrt{n!m!}}\lambda^{*n}\mu^m. \tag{18}$$

设 $\langle n|A|m\rangle$ 是行为规则的函数，可以定义一个算符的整函数(entire function)

$$A(\lambda^*,\mu)=\sum_{n,m=0}^{\infty}\sqrt{n!m!}\langle n|A|m\rangle\frac{\lambda^{*n}\mu^m}{n!m!}, \tag{19}$$

则

$$\langle\lambda|A|\mu\rangle=A(\lambda^*,\mu)e^{-|\lambda|^2/2-|\mu|^2/2}.$$

$A(\lambda^*,\mu)$ 称为算符 A 的相干态表象．也可称为 $\langle n|A|m\rangle$ 的母函数

(generating function).

$\langle\lambda|A|\mu\rangle$的对角元为

$$\begin{aligned}\langle\lambda|A|\lambda\rangle &= A(\lambda^*,\lambda)e^{-|\lambda|^2} \\ &= \sum_{n,m=0}^{\infty}\sqrt{n!m!}\langle n|A|m\rangle\frac{\lambda^{*n}\lambda^m}{n!m!}e^{-|\lambda|^2}.\end{aligned} \tag{20}$$

(20)式的 Taylor 展开系数为

$$\sqrt{n!m!}\langle n|A|m\rangle = \left(\frac{\partial}{\partial\lambda^*}\right)^n\left(\frac{\partial}{\partial\lambda}\right)^m\langle\lambda|A|\lambda\rangle e^{|\lambda|^2}\Big|_{\lambda=0}.$$

这说明 $A(\lambda^*,\mu)$可以由对角元 $A(\lambda^*,\lambda)$导出,这反映相干态基是超完备的.

6.3 压 缩 态

相干态概念还可以推广.考虑声子的产生和湮没算符的线性迭加,定义算符 $b^\dagger$ 与 b,

$$\begin{aligned} b^\dagger &= \lambda a^\dagger + \nu a, \\ b &= \lambda a + \nu a^\dagger, \\ \lambda,\nu\ \text{实}&,\lambda^2-\nu^2=1. \end{aligned} \tag{1}$$

容易证明,

$$[b,b^\dagger] = (\lambda^2-\nu^2)[a,a^\dagger] = [a,a^\dagger] = 1. \tag{2}$$

从 $a^\dagger,a\to b^\dagger,b$ 的变换是一个幺正变换.与 Bogoliubov 的粒子-准粒子变换相似.当 $\lambda=1$ 时($\nu=0$),$b^\dagger=a^\dagger$,$b=a$,$b^\dagger$ 与 b 就回到原来的声子产生和湮没算符.

b 的本征态$|\beta\rangle$,

$$b|\beta\rangle = \beta|\beta\rangle, \tag{3}$$

具有一些不同于相干态的性质.可以证明,在此本征态下,谐振子的测不准关系 $\Delta x\Delta p=\hbar/2$ 仍然成立.但

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}|\lambda-\nu|,$$

$$\Delta p = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\,|\lambda + \nu|, \tag{4}$$

与参数 λ 和 ν 的取值有关. 在 $\lambda^2 - \nu^2 = 1$ 条件下,可以调节 λ 和 ν 的值,使 Δx 很小(相应 Δp 很大). 而对于相干态, $\Delta x = \sqrt{\hbar/2m\omega}$, $\Delta p = \sqrt{m\omega\hbar/2}$ 是固定的(对给定谐振子). 所以算符 b 的本征态称为压缩态(squeezed state).

现在来证明(4)式[10].

对于谐振子,引进无量纲变量 Q 和 P,

$$x = \sqrt{\hbar/m\omega}\,Q, \quad p = \sqrt{m\omega\hbar}\,P. \tag{5}$$

用声子产生和湮没算符来表示,

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a), \quad P = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a). \tag{6}$$

利用变换(1)之逆,

$$a^\dagger = \lambda b^\dagger - \nu b, \quad a = \lambda b - \nu b^\dagger, \tag{7}$$

代入(6)式,得

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda - \nu)(b^\dagger + b),$$

$$P = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\lambda + \nu)(b^\dagger - b), \tag{8}$$

$$Q^2 = \frac{1}{2}(\lambda - \nu)^2(b^{\dagger 2} + b^2 + 2b^\dagger b + 1),$$

$$P^2 = -\frac{1}{2}(\lambda + \nu)^2(b^{\dagger 2} + b^2 - 2b^\dagger b - 1).$$

在 b 的本征态 $|\beta\rangle$ 下, $(b|\beta\rangle = \beta|\beta\rangle, \langle\beta|b^\dagger = \beta^*\langle\beta|)$,平均值

$$\overline{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda - \nu)(\beta^* + \beta),$$

---

[10] 参阅:钱伯初,曾谨言. 量子力学习题精选与剖析. 北京:科学出版社,1988.90.

$$\bar{P} = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\lambda + \nu)(\beta^* - \beta), \tag{9}$$

$$\overline{Q^2} = \frac{1}{2}(\lambda - \nu)^2(\beta^{*2} + \beta^2 + 2\beta^*\beta + 1)$$

$$= \frac{1}{2}(\lambda - \nu)^2[1 + (\beta^* + \beta)^2],$$

$$\overline{P^2} = \frac{1}{2}(\lambda + \nu)^2[1 - (\beta^* - \beta)^2].$$

所以

$$\begin{aligned} \Delta Q &= [\overline{Q^2} - \bar{Q}^2]^{1/2} = |\lambda - \nu|/\sqrt{2}, \\ \Delta P &= [\overline{P^2} - \bar{P}^2]^{1/2} = |\lambda + \nu|/\sqrt{2}. \end{aligned} \tag{10}$$

由式(5)可知

$$\begin{aligned} \Delta x &= \sqrt{\hbar/m\omega}\,\Delta Q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,|\lambda - \nu|, \\ \Delta p &= \sqrt{m\omega\hbar}\,\Delta P = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\,|\lambda + \nu|. \end{aligned} \tag{11}$$

而

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}|\lambda^2 - \nu^2| = \hbar/2. \tag{12}$$

证毕.

变换(1)中参数 λ 与 ν 只有一个是独立的.我们不妨定义

$$b = \frac{a - \beta a^\dagger}{\sqrt{1 - |\beta|^2}}, \tag{13}$$

式中 β 相当于变换(1)中的 (ν/λ).此处不妨推广,允许 β 取复数.(13)式中因子 $[1 - |\beta|^2]^{-1/2}$ 是为了保证它是一个幺正变换.容易证明

$$[b, b^\dagger] = \frac{1}{1 - |\beta|^2}[a - \beta a^\dagger, a^\dagger - \beta^* a]$$

$$= \frac{1}{1 - |\beta|^2}(1 - |\beta|^2) = 1, \tag{14}$$

试求 b 的真空态，

$$b|\beta\rangle = 0 \tag{15}$$

即

$$a|\beta\rangle = \beta a^{\dagger}|\beta\rangle \tag{16}$$

$|\beta\rangle$可以表示成

$$|\beta\rangle = f(a^{\dagger})|0\rangle \tag{17}$$

$|0\rangle$为声子真空态 $a|0\rangle = 0$. 利用附录(4)式，

$$[a, f(a^{\dagger})] = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}a^{\dagger}}, \tag{18}$$

以及 $a|0\rangle = 0$，可得

$$af(a^{\dagger})|0\rangle = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}a^{\dagger}}|0\rangle. \tag{19}$$

从(16)，(17)式，有

$$af(a^{\dagger})|0\rangle = \beta a^{\dagger}f(a^{\dagger})|0\rangle. \tag{20}$$

比较(19)，(20)式，得

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}a^{\dagger}} = \beta a^{\dagger}f.$$

解出，得 $f(a^{\dagger}) \sim \mathrm{e}^{\frac{\beta}{2}a^{\dagger 2}}$. 所以

$$|\beta\rangle = N_{\beta}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\beta a^{\dagger 2}}, \tag{21}$$

N_{β} 为归一化常数. 可以证明[11]，$|N_{\beta}| = (1 - |\beta|^{2})^{1/4}$.

附录　一些有用的代数式

1　设$[A, B] = C$，则$[A, B^{n}] = nCB^{n-1}$　　(1)

证

$$\underline{[A, B^{n}]} = \underline{[A, B]}\underline{B^{n-1}} + B[A, B^{n-1}] = CB^{n-1} + B[A, B^{n-1}], \tag{a}$$

[11] Muñoz-Tapia R. Am. J. Phys., 1993, 61: 1005.

把 $n \to n-1$,则有

$$[A, B^{n-1}] = CB^{n-2} + B[A, B^{n-2}]$$

代入(a)式右端,得

$$[A, B^n] = 2CB^{n-1} + B^2[A, B^{n-2}] = \cdots = nCB^{n-1}.$$

推论:设 $f(B)$ 可展开成 B 的幂级数,则

$$[A, f(B)] = C\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}B}. \tag{2}$$

例如

1° $[A, \mathrm{e}^{\lambda B}] = \lambda C \mathrm{e}^{\lambda B}$ (3)

2° 利用 Bose 子产生与湮没算符对易式 $[a, a^\dagger] = 1$,可得

$$\begin{aligned}[a, f(a, a^\dagger)] &= \frac{\partial f}{\partial a^\dagger},\\ [a^\dagger, f(a, a^\dagger)] &= -\frac{\partial f}{\partial a}.\end{aligned} \tag{4}$$

3° $[a, \mathrm{e}^{\lambda a^\dagger - \lambda^* a}] = \lambda \mathrm{e}^{\lambda a^\dagger - \lambda^* a}$. (5)

所以 $$a\mathrm{e}^{\lambda a^\dagger - \lambda^* a}|0\rangle = \lambda \mathrm{e}^{\lambda a^\dagger - \lambda^* a}|0\rangle$$

令 $$|\lambda\rangle = \mathrm{e}^{\lambda a^\dagger - \lambda^* a}|0\rangle \tag{6}$$

则 $$a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

即 $|\lambda\rangle = \mathrm{e}^{\lambda a^\dagger - \lambda^* a}|0\rangle$ 是湮没算符 a 的本征态,本征值为 λ,一般为复数,$|\lambda\rangle$ 即相干态.

4° 令 $N = a^\dagger a$, $a^\dagger$ 与 a 满足 $[a, a^\dagger] = 1$.容易证明

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger, [N, a] = -a.$$

利用(1)及(6),可得

$$[N, a^m] = -ma^m, [N, a^{\dagger m}] = ma^{\dagger m},$$

即 $$Na^m = a^m N - ma^m \quad Na^{\dagger m} = a^{\dagger m}N + ma^{\dagger m}.$$

由此可以证明

$$\begin{aligned}a^{\dagger m}a^m &= N(N-1)\cdots(N-m+1),\\ a^m a^{\dagger m} &= (N+1)(N+2)\cdots(N+m),\end{aligned} \tag{7}$$

因为

$$
\begin{aligned}
a^{\dagger m}a^{m} &= a^{\dagger m-1}Na^{m-1} = \left[Na^{\dagger m-1} - (m-1)a^{\dagger m-1}\right]a^{m-1} \\
&= Na^{\dagger m-1}a^{m-1} - (m-1)a^{\dagger m-1}a^{m-1} \\
&= (N-m+1)a^{\dagger m-1}a^{m-1} \\
&= (N-m+1)(N-m+2)a^{\dagger m-2}a^{m-2} \\
&= \cdots = (N-m+1)(N-m+2)\cdots(N-1)N.
\end{aligned}
$$

2　设$[A,B]=C$,而且$[C,A]=0,[C,B]=0$,则

$$
e^{A+B} = e^{A}e^{B}e^{-C/2} = e^{B}e^{A}e^{C/2}. \tag{8}
$$

证

令 $$f(\lambda) = e^{\lambda A}e^{\lambda B}, (\lambda \text{ 参数}).$$

显然 $f(0)=1, f(1)=e^{A}\cdot e^{B}$.不难求出

$$
\frac{df}{d\lambda} = e^{\lambda A}(A+B)e^{\lambda B}.
$$

利用(3)式,$Ae^{\lambda B}=e^{\lambda B}(A+\lambda C)$,因而

$$
\frac{df}{d\lambda} = e^{\lambda A}\cdot e^{\lambda B}(A+B+\lambda C) = f(\lambda)(A+B+\lambda C),
$$

$$
df/f = (A+B+\lambda C)d\lambda.
$$

对 λ 积分,考虑到 C 与 A 和 B 对易,得

$$
\ln f(\lambda) - \ln f(0) = (A+B)\lambda + \frac{1}{2}C\lambda^2.
$$

所以

$$
f(\lambda) = f(0)e^{(A+B)\lambda+\frac{1}{2}C\lambda^2} = e^{(A+B)\lambda+\frac{1}{2}C\lambda^2}.
$$

右乘 $e^{-\frac{1}{2}C\lambda^2}$,得

$$
e^{\lambda(A+B)} = e^{\lambda A}e^{\lambda B}e^{-\frac{1}{2}\lambda^2 C}.
$$

$B\leftrightarrow A$,则有

$$
e^{\lambda(A+B)} = e^{\lambda B}e^{\lambda A}e^{\frac{1}{2}\lambda^2 C}.
$$

令 $\lambda=1$,即得(8)式.

例如

1° $e^{\lambda a^\dagger - \lambda^* a} = e^{\lambda a^\dagger} e^{-\lambda^* a} e^{-|\lambda|^2/2}$ (9)

2° $e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A,B]/2} = e^B e^A e^{-[B,A]/2} = e^B e^A e^{[A,B]/2}$，所以

$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A,B]}. \tag{10}$$

3 证明

$$e^A B e^{-A} = B + [A,B] + \frac{1}{2!}[A,[A,B]] + \frac{1}{3!}[A,[A,[A,B]]] + \cdots. \tag{11}$$

证

令

$$f(\lambda) = e^{\lambda A} B e^{-\lambda A},$$

显然 $f(0) = B, f(1) = e^A B e^{-A}$. 对 λ 求导

$$\frac{df}{d\lambda} = e^{\lambda A}(AB - BA)e^{-\lambda A} = e^{\lambda A}[A,B]e^{-\lambda A},$$

$$\frac{d^2 f}{d\lambda^2} = e^{\lambda A}(A[A,B] - [A,B]A)e^{-\lambda A} = e^{\lambda A}[A,[A,B]]e^{-\lambda A},$$

……

利用 Taylor 展开，

$$f(1) = f(0) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{d^n f}{d\lambda^n}\right)_{\lambda=0}$$

$$= B + [A,B] + \frac{1}{2!}[A,[A,B]] + \cdots.$$

此即(11)式.

推论：

$$e^{\lambda A} B^n e^{-\lambda A} = (e^{\lambda A} B e^{-\lambda A})^n. \tag{12}$$

$$e^{\lambda A} f(B) e^{-\lambda A} = f(e^{\lambda A} B e^{-\lambda A}). \tag{13}$$

例

1° $e^{\lambda a} a^\dagger e^{-\lambda a} = a^\dagger + \lambda, e^{\lambda a^\dagger} a e^{-\lambda a^\dagger} = a - \lambda.$ (14)

$$e^{\lambda a} f(a, a^\dagger) e^{-\lambda a} = f(a, a^\dagger + \lambda), \tag{15}$$

$$e^{\lambda a^\dagger} f(a, a^\dagger) e^{-\lambda a^\dagger} = f(a - \lambda, a^\dagger). \tag{16}$$

2° 令
$$D(\lambda) = e^{\lambda a^\dagger - \lambda^* a} = e^{\lambda a^\dagger} e^{-\lambda^* a} e^{-|\lambda|^2/2} \tag{17}$$

$$\begin{aligned} D(\lambda)D(\mu) &= e^{\lambda a^\dagger} e^{-\lambda^* a} \cdot e^{\mu a^\dagger} e^{-\mu^* a} e^{-(|\lambda|^2 + |\mu|^2)/2} \\ &= e^{(\lambda+\mu)a^\dagger} e^{-(\lambda^* + \mu^*)a} e^{-(|\lambda|^2 + |\mu|^2)/2}, \end{aligned}$$

$$D(\lambda + \mu) = e^{(\lambda+\mu)a^\dagger} e^{-(\lambda^* + \mu^*)a} e^{-|\lambda-\mu|^2/2},$$

所以

$$D(\lambda)D(\mu) = D(\lambda + \mu) e^{\frac{1}{2}(\lambda\mu^* + \lambda^*\mu)} \tag{18}$$

利用 $D(0)=1$,可得 $D(\lambda)D(-\lambda)=1$,即 $D(\lambda)^{-1} = D(-\lambda)$.定义为 $D^\dagger(\lambda)$,

$$D^\dagger(\lambda) = D(-\lambda) = e^{-\lambda a^\dagger + \lambda^* a} \tag{19}$$

容易验证 $D^\dagger(\lambda)D(\lambda) = 1$.所以令 $|\lambda\rangle = D(\lambda)|0\rangle$,则

$$D^\dagger(\lambda)|\lambda\rangle = |0\rangle.$$

3°
$$D^\dagger(\lambda) a D(\lambda) = a + \lambda \tag{20}$$

$$D^\dagger(\lambda) a^\dagger D(\lambda) = a^\dagger + \lambda^* \tag{21}$$

$$D^\dagger(\lambda) f(a, a^\dagger) D(\lambda) = f(a + \lambda, a^\dagger + \lambda^*) \tag{22}$$

7 密度矩阵

7.1 投影算符与密度算符

一个无自旋粒子在坐标空间中的概率分布密度由下式给出

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}), \tag{1}$$

而概率流密度(无磁场情况)为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) &= -\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*(\boldsymbol{r})\nabla\psi(\boldsymbol{r}) - \psi(\boldsymbol{r})\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})] \\ &= \frac{1}{2m}[\psi^*(\boldsymbol{r})\hat{\boldsymbol{p}}\psi(\boldsymbol{r}) - \psi(\boldsymbol{r})\hat{\boldsymbol{p}}^*\psi^*(\boldsymbol{r})].\end{aligned} \tag{2}$$

初学者常常提出如下问题:$\rho(\boldsymbol{r})$与$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$是波函数,还是算符?或者什么别的东西?

量子力学中的波函数或算符本身都不是直接观测量,而$\rho(\boldsymbol{r})$与$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$显然是可观测的物理量.所以它们既非波函数,也非算符.稍加仔细分析可以看出,它们分别是下列算符在给定量子态$|\psi\rangle$下的平均值

$$P(\boldsymbol{r}) = |\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|, \tag{3}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{K}(\boldsymbol{r}) &= \frac{1}{2m}[|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{p}} + \hat{\boldsymbol{p}}|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|] \\ &= \frac{1}{2m}[P(\boldsymbol{r})\hat{\boldsymbol{p}} + \hat{\boldsymbol{p}}P(\boldsymbol{r})],\end{aligned} \tag{4}$$

因为

$$\begin{aligned}\langle\psi|P(\boldsymbol{r})|\psi\rangle &= \langle\psi|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\psi\rangle \\ &= |\psi(\boldsymbol{r})|^2 = \rho(\boldsymbol{r}),\end{aligned}$$

$$\langle\psi|\boldsymbol{K}(\boldsymbol{r})|\psi\rangle=\frac{1}{2m}[\langle\psi|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{p}}|\psi\rangle$$
$$+\langle\psi|\hat{\boldsymbol{p}}|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\psi\rangle]$$
$$=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}[\psi^*(\boldsymbol{r})\nabla\psi(\boldsymbol{r})$$
$$-\psi(\boldsymbol{r})\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})]=\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}).$$

$P(\boldsymbol{r})=|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|$是一个投影算符.更确切地说,它是坐标表象(以粒子坐标的本征态$|\boldsymbol{r}\rangle$为基矢)中的投影算符.例如,量子态$|\psi\rangle$经过投影后为$P(\boldsymbol{r})|\psi\rangle=\psi(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{r}\rangle$.基矢的完备性表现为

$$\int \mathrm{d}^3x|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|=\int \mathrm{d}^3xP(\boldsymbol{r})=1. \tag{5}$$

更普遍讲,设体系的一组力学量完全集F的共同本征态记为$|n\rangle$,

$$F|n\rangle=F_n|n\rangle. \tag{6}$$

设F_n分立,则以$|n\rangle$为基矢的表象中的投影算符为

$$\begin{aligned}&P_n=|n\rangle\langle n|,\\&\sum_n P_n=\sum_n|n\rangle\langle n|=1(\text{完备性}).\end{aligned} \tag{7}$$

此投影算符在量子态$|\psi\rangle$下的平均值为

$$\langle\psi|P_n|\psi\rangle=\langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle=|a_n|^2, \tag{8}$$

式中

$$a_n=\langle n|\psi\rangle \tag{9}$$

是$|\psi\rangle$在$|n\rangle$表象中的表示,而$|a_n|^2$表示在$|\psi\rangle$态下测量F取值为F_n的几率.

以上讨论的是与某一特定的力学量完全集的本征态相应的投影算符.下面对此概念进行推广,定义与量子态$|\psi(t)\rangle$(设已归一化)相应的投影算符

$$\rho(t)=|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|, \tag{10}$$

即人们称之为与量子态$|\psi(t)\rangle$相应的密度算符.显然,

$$\rho^\dagger=\rho, \tag{11}$$

而且

$$\rho^2 = \rho. \tag{12}$$

如采用一个具体表象,例如$|n\rangle$表象,则与$|\psi\rangle$态相应的密度算符可表成如下矩阵形式,称为密度矩阵,

$$\begin{aligned}\rho_{nn'} &= \langle n|\rho(t)|n'\rangle \\ &= \langle n|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|n'\rangle = a_n(t)a_{n'}^*(t),\end{aligned} \tag{13}$$

其对角元为

$$\rho_{nn} = |a_n(t)|^2, \tag{14}$$

是在$|\psi(t)\rangle$态下测量 F 取 F_n 值的概率. 如$|\psi\rangle$就是 F 的某一个本征态$|k\rangle$,则 $\rho_{nn'} = \langle n|k\rangle\langle k|n'\rangle = \delta_{nk}\delta_{n'k} = \delta_{nn'}\delta_{nk}$,其非对角元一定为 0,密度矩阵成为对角矩阵,且对角元素中只有一个元素不为零(假设基矢$|n\rangle$对 F_n 无简并),即 $\rho_{nn} = \delta_{nk}$(参见下面例 1).

根据波函数$|\psi(t)\rangle$归一化性质,容易看出

$$\mathrm{tr}\rho = \sum_n |a_n|^2 = 1. \tag{15}$$

利用 F 表象的基矢之间的转换算符$|n\rangle\langle n'|$,密度算符 ρ 还可以表示成

$$\begin{aligned}\rho &= |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \\ &= \sum_{nn'} |n\rangle\langle n|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|n'\rangle\langle n'| \\ &= \sum_{nn'} a_n(t)a_{n'}^*(t)|n\rangle\langle n'|.\end{aligned} \tag{16}$$

从(13)式和(16)式可以看出,密度矩阵的非对角元 $\rho_{nn'}$ 与在$|\psi(t)\rangle$态下测量 F 取 $F_{n'}$ 值或 F_n 值的概率有关. 若在$|\psi(t)\rangle$态下测 F 得 F_n 或 $F_{n'}$ 的概率为 0 (即$|\psi(t)\rangle$不含$|n\rangle$或$|n'\rangle$态),则 $\rho_{nn'} = 0$.

在态$|\psi(t)\rangle$下,力学量 G 的平均值为

$$\begin{aligned}\langle G\rangle &= \langle\psi|G|\psi\rangle \\ &= \sum_{nn'} \langle\psi|n\rangle\langle n|G|n'\rangle\langle n'|\psi\rangle \\ &= \sum_{nn'} a_n^* G_{nn'} a_{n'} = \sum_{nn'} \rho_{n'n} G_{nn'}\end{aligned} \tag{17}$$

$$= \sum_{n'} (\rho G)_{n'n'} = \sum_{n} (G\rho)_{nn},$$

即

$$\langle G \rangle = \mathrm{tr}(\rho G) = \mathrm{tr}(G\rho). \tag{18}$$

对于 $G = F$ 情况，$G_{nn'} = F_n \delta_{nn'}$，则

$$\langle F \rangle = \mathrm{tr}(\rho F) = \sum_n |a_n|^2 F_n. \tag{19}$$

在 $|\psi(t)\rangle$ 态下，测 F 得 F_n 的概率为

$$P(F_n) = \mathrm{tr}(P_n \rho) = \mathrm{tr}(\rho P_n), \tag{20}$$

式中 $P_n = |n\rangle\langle n|$，因为

$$P_n \rho = |n\rangle\langle n|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = a_n(t)|n\rangle\langle\psi(t)|,$$

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}(P_n \rho) &= a_n(t)\mathrm{tr}(|n\rangle\langle\psi(t)|) \\ &= a_n(t)\mathrm{tr}(\langle\psi(t)|n\rangle) = |a_n(t)|^2. \end{aligned}$$

密度算符 $\rho(t)$ 随时间演化的规律可由 Schrödinger 方程得出，

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho(t) &= \frac{\mathrm{d}|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)| + |\psi(t)\rangle \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)| \\ &= \frac{\hat{H}}{\mathrm{i}\hbar}|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| + |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \frac{\hat{H}}{-\mathrm{i}\hbar} \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{H}, \rho(t)]. \end{aligned} \tag{21}$$

例 1 在 Pauli(σ_z)表象中，求 σ_x 本征态相应的密度矩阵.

σ_z 表象两个基矢为 $|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$，$|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. 在此表象中，$\sigma_x = \pm 1$的本征态分别为

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \tag{22}$$

不难求出，与 $\sigma_x = +1$ 本征态相应的密度矩阵为

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{23}$$

(例如 $\rho_{11} = \langle 1|+\rangle\langle +|1\rangle = (1/\sqrt{2})(1/\sqrt{2}) = 1/2$，等). 对角元

$\rho_{11}=\rho_{22}=1/2$ 表示在 $\sigma_x=+1$ 的本征态下，测 $\sigma_z=\pm 1$ 的概率都是 1/2. 非对角元不为 0，表示在 $\sigma_x=+1$ 的本征态下，测得粒子 $\sigma_z=+1$和 $\sigma_z=-1$ 的几率之间有关系.

σ_z 表象→σ_x 表象的幺正变换矩阵为

$$S=\begin{pmatrix}\langle + | 1\rangle & \langle + | 2\rangle \\ \langle - | 1\rangle & \langle - | 2\rangle\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1 \\ 1 & -1\end{pmatrix} \tag{24}$$

逆变换为

$$S^{-1}=\begin{pmatrix}\langle 1 | +\rangle & \langle 1 | -\rangle \\ \langle 2 | +\rangle & \langle 2 | -\rangle\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1 \\ 1 & -1\end{pmatrix} \tag{25}$$

容易验证 $SS^{-1}=1$. σ_z 表象中 $\sigma_x=+1$ 本征态相应的密度矩阵 (23)，在 σ_x 表象中化为

$$S\,\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1 \\ 1 & 1\end{pmatrix}S^{-1}=\begin{pmatrix}1 & 0 \\ 0 & 0\end{pmatrix} \tag{26}$$

这是意料中的事. 此时 ρ 为对角矩阵，而且只有一个元素不为 0 (为 1).

例 2 电子自旋 $\boldsymbol{s}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ 在空间 $\boldsymbol{n}(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$ 方向分量 $\sigma_n=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征态分别为(Pauli 表象)

$$|\sigma_n=+1\rangle=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\end{pmatrix},$$

$$|\sigma_n=-1\rangle=\begin{pmatrix}\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2} \\ -\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\end{pmatrix}, \tag{27}$$

相应的密度矩阵为

$$\sigma_n=+1,\qquad \begin{pmatrix}\cos^2\dfrac{\theta}{2} & \sin\dfrac{\theta}{2}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ \sin\dfrac{\theta}{2}\cdot\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & \sin^2\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix},$$

$$\sigma_n = -1, \quad \begin{pmatrix} \sin^2\dfrac{\theta}{2} & -\sin\dfrac{\theta}{2}\cos\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi} \\ -\sin\dfrac{\theta}{2}\cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi} & \cos^2\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \tag{28}$$

当 $\theta=\varphi=0$ 时，$|\sigma_n=+1\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，$|\sigma_n=-1\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$，相应的密度矩阵分别为

$$\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{29}$$

当 $\theta=\pi/2,\varphi=0$ 时，则 $|\sigma_n=+1\rangle=|\sigma_x=+1\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$，

$$|\sigma_n=-1\rangle=|\sigma_x=-1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix},$$

而相应的密度矩阵为

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -1\\ -1 & 1\end{pmatrix}. \tag{30}$$

在 $\sigma_n=+1$ 态下，

$$\begin{aligned} \langle s_z\rangle &= \frac{\hbar}{2}\mathrm{tr}(\sigma_z\rho) = \frac{\hbar}{2}\cos\theta, \\ \langle s_x\rangle &= \frac{\hbar}{2}\mathrm{tr}(\sigma_x\rho) = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos\varphi, \\ \langle s_y\rangle &= \frac{\hbar}{2}\mathrm{tr}(\sigma_y\rho) = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\sin\varphi. \end{aligned} \tag{31}$$

例 3 用极化矢量来表示密度矩阵.

可以证明，任何 2×2 矩阵均可表成 Pauli 矩阵 $\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$ 以及 2×2 单位矩阵的线性叠加. 因此，与电子某自旋态 $|\psi\rangle$ 相应的密度矩阵可以表示为

$$\rho = a_0 I + \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}. \tag{32}$$

a_0 与 $\boldsymbol{a}$ 待定，不难证明 $\mathrm{tr}\rho=2a_0=1$，所以 $a_0=1/2$. 又 $\mathrm{tr}(\rho\sigma_i)=\langle\sigma_i\rangle=2a_i$，所以 $\quad a_i=\dfrac{1}{2}\langle\sigma_i\rangle$，$\boldsymbol{a}=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle$. 定义

$$\boldsymbol{P} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \langle \psi | \boldsymbol{\sigma} | \psi \rangle \tag{33}$$

为自旋态$|\psi\rangle$的极化矢量.则与$|\psi\rangle$态相应的密度矩阵为

$$\rho = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{\sigma}). \tag{34}$$

例如,对于$\sigma_n = 1$的本征态(27)式,相应的密度矩阵为(利用(31)式)

$$\rho = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \\ \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} & \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

与(28)式相同.

7.2 混合态相应的密度算符

实验室中有时制备出来的体系,并不处于一个纯量子态,即不处于某一组力学量完全集的共同本征态.例如从温度为T的炉子中蒸发出来的原子,自然光源发出的非偏振光等.人们对这种状态下的体系能够了解到的信息是不完备的.我们如何去建立一种理论形式以给出对它们尽可能多的信息?为此,需要推广上节中的密度算符的概念.

设$|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \cdots, |\psi_n\rangle, \cdots$表示力学量完全集$L$的共同本征态,而体系在时刻$t$处于$|\psi_k\rangle (k = 1,2,\cdots)$的概率为$P_k$,($0 \leqslant P_k \leqslant 1, \sum\limits_k P_k = 1$),即处于一系列纯态$|\psi_k\rangle$的某种统计混合态.定义与此混合态相应的密度算符

$$\rho = \sum_k P_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \sum_k P_k \rho_k, \tag{1}$$

其中

$$\rho_k = |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \tag{2}$$

是与纯态$|\psi_k\rangle$相应的密度算符(设$|\psi_k\rangle$已归一化).不难证明,这个推广了的密度算符仍然具有如下性质:

$$\rho^{\dagger} = \rho, \tag{3}$$

$$\mathrm{tr}\rho = \sum_k P_k \mathrm{tr}\rho_k = \sum_k P_k = 1, \tag{4}$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho &= \sum_k P_k \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_k = \sum_k P_k \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{H},\rho_k], \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{H},\sum_k P_k\rho_k] = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{H},\rho].\end{aligned} \tag{5}$$

但与纯态相应的密度算符不同，$\rho^2=\rho$ 这个条件不再满足，即

$$\begin{aligned}\rho^2 &= \sum_{kk'} P_k P_{k'} |\psi_k\rangle\langle\psi_k|\psi_{k'}\rangle\langle\psi_{k'}| \\ &= \sum_{kk'} P_k P_{k'} |\psi_k\rangle\delta_{kk'}\langle\psi_{k'}| \\ &= \sum_k P_k^2 |\psi_k\rangle\langle\psi_k|, (P_k^2 \leqslant P_k) \\ &\leqslant \sum_k P_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \rho,\end{aligned} \tag{6}$$

所以 $\rho^2\leqslant\rho$，等号只在纯态时成立. 因而 $\mathrm{tr}\rho^2\leqslant 1$.

在用 ρ 描述的混合态下，力学量 G 的平均值仍可表示为

$$\begin{aligned}\langle G\rangle &= \sum_k P_k\langle\psi_k|G|\psi_k\rangle \\ &= \sum_k P_k \mathrm{tr}(\rho_k G) \\ &= \mathrm{tr}(\sum_k P_k\rho_k G) = \mathrm{tr}(\rho G).\end{aligned} \tag{7}$$

在力学量完全集 F 的本征态 $|n\rangle$ $(F|n\rangle = F_n|n\rangle)$ 所张开的表象中，ρ 表示为如下密度矩阵

$$\begin{aligned}\rho_{nn'} &= \sum_k P_k\langle n|\psi_k\rangle\langle\psi_k|n'\rangle \\ &= \sum_k P_k C_n^k C_{n'}^{k*}, \\ C_n^k &= \langle n|\psi_k\rangle, C_{n'}^{k*} = \langle\psi_k|n'\rangle.\end{aligned} \tag{8}$$

对角元为

$$\rho_{nn} = \sum_k P_k |C_n^k|^2, \tag{9}$$

$|C_n^k|^2$ 为在纯态 $|\psi_k\rangle$ 下测量 F 得 F_n 的概率. ρ_{nn} 称为在混合态下量子态 $|n\rangle$ 的 population, 即在混合态下测得体系处于 $|n\rangle$ 态的概率.

非对角元 $\rho_{nn'}$ 称为 coherence, 表征在混合态下出现 $|n\rangle$ 态与 $|n'\rangle$ 态的相干效应. 如所选表象的基矢 (F 本征态), 就是 L 本征态, 即 $F = L$, 则 $C_n^k = \delta_{kn}$, 而 $\rho_{nn'} = \sum_k P_k \delta_{kn}\delta_{kn'} = P_n \delta_{nn'}$, 成为对角矩阵, 对角元 $\rho_{nn} = P_n$.

如力学量完全集 F 中包含了体系的 Hamilton 量 (不显含 t), $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$, 则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_{nn'}(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(E_n - E_{n'})\rho_{nn'}(t) \tag{10}$$

所以

$$\rho_{nn'}(t) = \rho_{nn'}(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{nn'}t} \tag{11}$$

$\omega_{nn'} = (E_n - E_{n'})/\hbar$, 非对角元以角频率 $\omega_{nn'}$ 振荡, 但对角元不随时间变化, $\rho_{nn}(t) = \rho_{nn}(0)$.

总之, 完备测量的实验装置制备出的体系, 处于一个纯量子态, 通常用一个波函数来描述, 但也可以用相应的密度矩阵来描述. 对于非完备测量实验装置制备出的体系, 则处于混合态, 体系有一定的概率分别处于各纯态, 此时体系状态不能用单一的一个波函数来描述, 而只能用相应的密度矩阵来描述. 此密度矩阵的形式依赖于制备体系的实验装置(环境)以及所选择的表象. 但要注意, 不同的实验装置制备出的混合态所相应的密度矩阵, 有时可以相同(见例 1). 历史上, 密度矩阵概念最早由 Landau[1] 和 von Neumann[2] 引进. 其目的就是为了描述不完备制备出的体系, 它所处

---

[1] Landau L D. Z. Physik, 1927, **45**: 430.

[2] Neumann J von. *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Berlin: Julius Springer, 1931.

状态并非纯态，而是混合态.

例1 从高温炉蒸发出的银原子(自旋为 1/2)，自旋指向完全无规，等几率指向空间各方向(θ,φ)，用下列密度矩阵描述，

$$\rho = \frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}\Omega \rho(\theta,\varphi) \tag{12}$$

式中 $1/4\pi$ 是归一化因子，$\rho(\theta,\varphi)$是自旋沿(θ,φ)方向分量的本征态相应的密度矩阵(见上节(28)式). 积分后，得

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} \tag{13}$$

可以看出，$\mathrm{tr}\rho = 1$，但 $\rho^2 = \frac{1}{2}\rho$，这是混合态的特征.

注意，通过不同的制备方式得到的混合态的密度矩阵可以相同. 例如，制备出的电子有 1/2 几率处于$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$态，有 1/2 几率处于$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$态，即 $P_1 = P_2 = 1/2$，则密度矩阵为

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} \tag{14}$$

与(13)式相同. 用这样的密度矩阵描述的混合态的一个特点是，电子自旋沿任何方向分量的平均值均为 0，

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \mathrm{tr}(\rho\boldsymbol{\sigma}) = 0. \tag{15}$$

可以想到，此密度矩阵在任何表象中形式都一样. 例如在 σ_x 表象中，此密度矩阵为(参阅上节(24)式)

$$S\rho S^{-1} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{16}$$

这是意料中的事，因为 $\rho = \frac{1}{2}I$，I 为单位矩阵，而单位矩阵在任何表象中都是单位矩阵.

我们注意到，在 $\sigma_x = +1$ 的纯态$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$下测量 σ_z 得到$\sigma_z = +1$

的概率为1／2，$\sigma_z=-1$ 的概率也是 1／2. 乍一看来，与上述混合态有相似之处. 实际上两者有极大差异. 初学者往往对此弄混. 这也反映出对波函数的统计诠释和态叠加原理的误解.

初学者中有不少人认为：在 $\sigma_x=+1$ 的本征态$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$下，电子自旋态是 $\sigma_z=+1$ 态与 $\sigma_z=-1$ 态的叠加意味着电子已有 1／2 概率处于 $\sigma_z=+1$ 态，同时有 1／2 概率处于 $\sigma_z=-1$ 态. 这是完全错误的. 按此看法，将会导致如下荒谬的论证和结论：

对于处于 $\sigma_z=1$ 的电子，$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}+\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\right]$，有 1／2 概率处于 $\sigma_x=-1$

对于处于 $\sigma_z=-1$ 的电子，$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\right]$，有 1／2 概率处于 $\sigma_x=-1$

因此，对于处于 $|\sigma_x=+1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$ 态的电子有 1／2 概率处于 $|\sigma_x=-1\rangle$态，因为$\frac{1}{2}\times\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\times\frac{1}{2}=1/2$. 这显然是荒谬的. 事实上，$|\sigma_x=+1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$态与$|\sigma_x=-1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$态是完全正交的. 这里的错误在于把纯态中的统计诠释概念与混合态中的概率分布概念混为一谈. 具体说来，就是把用密度矩阵 $\rho=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&1\\1&1\end{pmatrix}$描述的纯态 $|\sigma_x=+1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$，与用密度矩阵 $\rho=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$描述的混合态混为一谈所致. 对于纯态 $|\sigma_x=+1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right]=\frac{1}{\sqrt{2}}[|\sigma_z=+1\rangle+|\sigma_z=-1\rangle]$，两个叠加态之间有确切的相位关系，而在混合态 $\rho=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$中，$|\sigma_z=+1\rangle$态电子与$|\sigma_z=-1\rangle$态电子之间无相位关联，是完全非极化的混合态，表现为：在任何表象中，

ρ形式不变，非对角元为0. 相反，对于纯态$|\sigma_x=+1\rangle$，在σ_z表象中，$\rho=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$，非对角元不为0，尽管在$\sigma_x$表象中，它化为对角矩阵$\rho=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$.

例2 与大热源达到平衡，温度为T的体系(正则系综)，处于非纯态，密度算符表示为

$$\rho=\frac{1}{Z}e^{-\beta H} \tag{17}$$

式中$\beta=1/kT$，k为Boltzmann常数，$\hat{H}$为Hamilton量，$Z=\mathrm{tr}(e^{-\beta H})$称为配分函数(partition函数). 在能量表象中(基矢$|n\rangle$，$H|n\rangle=E_n|n\rangle$)，ρ化为对角矩阵

$$\begin{aligned}\rho_{nn'}&=\frac{1}{Z}e^{-\beta E_n}\delta_{nn'}\\ Z&=\sum_n e^{-\beta E_n}\end{aligned} \tag{18}$$

以谐振子为例. $E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$，$n=0,1,2,\cdots$，不难求出

$$\begin{aligned}Z&=\sum_n e^{-\beta\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega}\\ &=e^{-\beta\hbar\omega/2}\cdot(1-e^{-\beta\hbar\omega})^{-1}\end{aligned} \tag{19}$$

谐振子处于E_n能级的概率为

$$\begin{aligned}P(E_n)&=\mathrm{tr}(\rho P_n)=\frac{1}{Z}\mathrm{tr}(e^{-\beta H}|n\rangle\langle n|)\\ &=\frac{1}{Z}e^{-\beta E_n}\mathrm{tr}(|n\rangle\langle n|)=\frac{1}{Z}e^{-\beta E_n}\end{aligned} \tag{20}$$

而能量平均值为

$$\begin{aligned}\langle E\rangle&=\mathrm{tr}(\rho\hat{H})=\sum_n P(E_n)E_n\\ &=\frac{1}{Z}\sum_n e^{-\beta E_n}E_n=-\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial\beta}Z\end{aligned}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \beta}\ln Z = \hbar\omega\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}\right] \tag{21}$$

不难看出，当 $T \to \infty$（$\beta \to 0$）时，$\langle E\rangle \to 1/\beta = kT$，与经典统计力学中的能量均分定理一致（见图 7.1）.

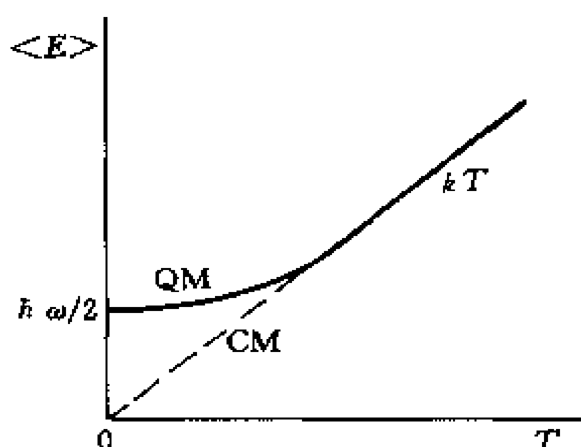


图 7.1 谐振子

例 3 晶体的振动

例 2 的结果可用以分析晶体的振动. 设晶体含有 N 个原子（离子），各原子看成具有三个自由度的粒子，以相同的圆频率 ω 在各自的平衡点附近作简谐振动. 所以晶体振动能的平均值为 $U = 3N\langle E\rangle$，热容为

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = 3N\hbar\omega\frac{\partial}{\partial T}(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^{-1}, \quad \beta = 1/kT$$

$$= 3Nk\left(\frac{\hbar\omega}{\beta}\right)^2\frac{e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2} \tag{22}$$

令 $\hbar\omega = k\Theta_E$，Θ_E 称为 Einstein 温度，则

$$C = 3Nk\left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2\frac{e^{\Theta_E/T}}{(e^{\Theta_E/T} - 1)^2} \tag{23}$$

热容 C 随温度的变化，如图 7.2 所示.

对于高温极限（$T/\Theta_E \gg 1$），$C \approx 3Nk$，即经典极限. 而对于低温极限（$T/\Theta_E \ll 1$），

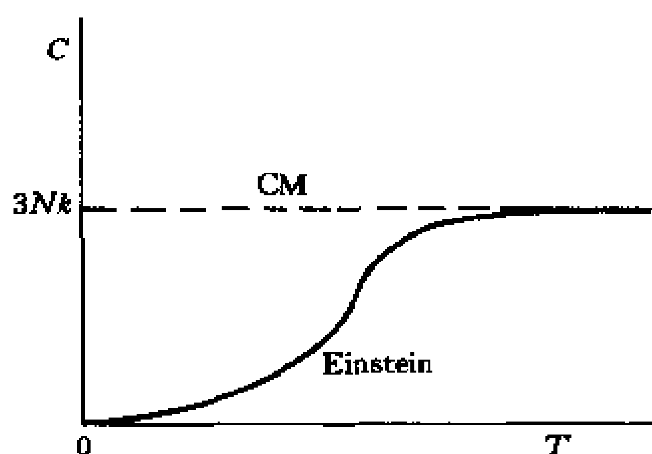


图 7.2　晶体比热

$$C \approx 3Nk\left(\frac{\Theta_{\mathrm{E}}}{T}\right)^2 e^{-\Theta_{\mathrm{E}}/T} \tag{24}$$

当 $T\to 0$ 时，$C\to 0$. 但仔细的实验分析表明，在极低温下，晶体热容 $C\propto T^3$，与上式有出入. 原因是在上面的讨论中假定了所有原子的振动频率相同. 后来 Debye 放弃了上述假定，改进了 Einstein 的工作，得到了与实验更符合的结果.

以上结果与二能级体系比较是有趣的. 设二能级为 $E_1<E_2$. 能量平均值为

$$\langle E\rangle = \frac{E_1 e^{-E_1/kT} + E_2 e^{-E_2/kT}}{e^{-E_1/kT} + e^{-E_2/kT}} \tag{25}$$

当 $T\to 0$ 时，$\langle E\rangle\to E_1$，这表示热运动消失，体系冻结在较低能级 E_1. 与此相反，当 $T\to\infty$，$\langle E\rangle\to\frac{1}{2}(E_1+E_2)$，这表示热运动能量很大，与之相比，两能级间距$(E_2-E_1)$是微不足道的，因而体系处于两条能级的概率相同，都是 1／2. 此外，由于在 $T\to 0$ 和 $T\to\infty$ 两个极限下，能量平均值都趋于常数(不依赖于 T)，所以不仅在低温极限下热容趋于 0(象谐振子那样)，而且在高温极限下热容也趋于 0.

例 4　双原子分子的转动

转动能为

$$E_L = \frac{\hbar^2}{2I}L(L+1), L = 0,2,\cdots, \tag{26}$$

I 为转动惯量，能级简并度为$(2L+1)$. 配分函数为

$$Z_r = \sum_{L=0}^{\infty}(2L+1)\exp\left[-\frac{\beta\hbar^2}{2I}L(L+1)\right]. \tag{27}$$

对于低温情况，$kT \ll \hbar^2/2I$，上式求和中保留 $L=0,1$ 两项，则

$$Z_r \approx 1 + 3\exp[-\beta\hbar^2/I]. \tag{28}$$

此时，转动能的平均值为

$$\langle E_r\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z \approx -(1+3e^{-\beta\hbar^2/I})^{-1}\frac{\partial}{\partial\beta}[3e^{-\beta\hbar^2/I}]$$

$$\approx -3\frac{\partial}{\partial\beta}e^{-\beta\hbar^2/I} = \frac{3\hbar^2}{I}e^{-\beta\hbar^2/I} \tag{29}$$

因此转动热容为

$$C_r = N\frac{\partial}{\partial T}\langle E_r\rangle = \frac{3N\hbar^2}{I}\frac{\partial\beta}{\partial T}\frac{\partial}{\partial\beta}e^{-\beta\hbar^2/I}$$

$$= 3Nk\left(\frac{\hbar^2}{IkT}\right)^2 e^{-\hbar^2/IkT}$$

$$= 3Nk\left(\frac{2\Theta_r}{T}\right)^2 e^{-2\Theta_r/T} \tag{30}$$

式中　$k\Theta_r = \hbar^2/2I$. 在低温极限 $T/\Theta_r \to 0$ 下，$C_r \to 0$.

对于高温情况($T/\Theta_r \gg 1$)，可把对 L 求和化为积分，令 $x = L(L+1)$，则

$$Z_r = \int_0^{\infty}dx\, e^{-x\beta\hbar^2/2I} = 2I/\beta\hbar^2 \tag{31}$$

$$\langle E_r\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z = 1/\beta = kT \tag{32}$$

$$C_r = N\frac{\partial}{\partial T}\langle E_r\rangle = Nk = R(\text{气体常数}) \tag{33}$$

此即经典极限. 几个常见双原子分子的 Θ_r 值如下：[3]

分子	H_2	HCl	HI	N_2	Cl_2	I_2
Θ_r(K)	85.4	15.2	9.0	2.82	0.346	0.054
Θ_E(K)	6210	4140	3200	3340	810	310

对于双原子分子的振动，如视为谐振子振动，也可以与例 3 相同，求其振动热容. 也可以定义相应的 $\Theta_E = \hbar\omega/k$. 但其数值比 Θ_r 大得多(见上表).

例 5　顺磁磁化率

自旋为 $\hbar/2$ 的粒子，磁矩 $\boldsymbol{\mu} = gs\ (g<0)$，处于均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ (沿 z 方向)中，Hamilton 量 $\hat{H} = -\mu_z B = -gBs_z$，有两条能级，分别为 $\pm\frac{1}{2}\hbar\omega_0$，$(\omega_0 = -gB>0)$. 设与大热源(温度 T)达到热平衡，则密度矩阵(取 Pauli 表象)为

$$\rho = \frac{1}{Z}\begin{pmatrix} e^{-\hbar\omega_0/2kT} & 0 \\ 0 & e^{\hbar\omega_0/2kT}\end{pmatrix}, \tag{34}$$

$$Z = e^{-\hbar\omega_0/2kT} + e^{\hbar\omega_0/2kT}.$$

由此可计算出，粒子自旋沿垂直于磁场方向分量的平均值为 0，$\langle s_x\rangle = \mathrm{tr}(\rho s_x) = 0$，$\langle s_y\rangle = \mathrm{tr}(\rho s_y) = 0$，但沿磁场方向分量的平均值为

$$\langle s_z\rangle = \mathrm{tr}(\rho s_z) = -\frac{\hbar}{2}\tanh\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right). \tag{35}$$

在低温极限下 $(T\to 0)$ 或强磁场极限 $(B\to\infty)$，$\tanh(\hbar\omega_0/2kT)\to 1$，$\langle s_z\rangle = -\hbar/2$，即所有粒子都冻结在较低能级上 $(s_z = -\hbar/2)$，处于纯态，$\rho = \begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$. 在高温极限 $(T\to\infty)$ 下，$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$，是一个完全混合态，粒子等概率处于两条能级上，$\langle s_z\rangle$

---

〔3〕 取自 Mandl F. *Statistical Physics*. Manchester: Manchest University Press, 1971, 253 ~ 254.

$= 0$. 在一般情况下,$0 < |\langle s_z \rangle| < \hbar/2$.

顺磁磁化率(paramagnetic susceptibility)χ 定义为 $\langle \mu_z \rangle = g\langle s_z \rangle = \chi B$,所以

$$\chi = \frac{\hbar}{2}\frac{|g|}{B}\tanh\left(\frac{\hbar |g| B}{2kT}\right). \tag{36}$$

7.3 约化密度矩阵,EPR 佯谬,Bell 不等式

7.3.1 复合体系,约化密度矩阵.

按照 Lamb 等人[4][5]的观点,一个量子力学实验包含下列过程:(a)初态制备.(b)在某种作用(通常视为微扰)下量子态的演化.(c)末态分析(例如类似 Stern-Gerlach 实验那样的理想过程,或者某些可观测量之间的关联,如角关联、偏振关联等).前面已经提到,若初态的制备是不完全的,即初态并不处于纯态,而是一个混合态,则体系的状态不能简单地用一个波函数来描述,而应采用密度矩阵.这里我们应该提到[6],若末态的测量只是对复合体系的一部分(子体系)进行,同样也必须采用密度矩阵.事实上,对于一个复合体系来讲,测量其子体系相关的可观测量,是一个不完全的测量.这类似于对一个多自由度的体系只测量与其部分自由度相应的可观测量,因而测量是不完全的.

考虑复合体系 A + B.设 $|a\rangle$ 构成体系 A 的量子态的一组完全集,$|b\rangle$ 构成体系 B 的量子态的一组完全集,则 $|a,b\rangle = |a\rangle \otimes |b\rangle$($|a\rangle$ 与 $|b\rangle$ 的直积)构成复合体系 A + B 的量子态的一组完全

---

[4] Lamb W E Jr. Physics Today, 1969, 22:23.

[5] Goldberger M L, Watson K M. Phys. Rev. 1964, 134: B919; Margenau H. *The Nature of Physical Reality*. New York: McGraw-Hill, 1950.

[6] Cantrell C D, Scully M O. Physics Reports, 1978, 43(13): 499 ~ 508.

集.(但注意,并非 A + B 的所有量子态都可以表示成$|a\rangle\otimes|b\rangle$形式.例如$|\psi\rangle = c_1|a_1,b_1\rangle + c_2|a_2,b_2\rangle$一般就不能表成直积形式.$|a\rangle\otimes|b\rangle$作为基矢的表象可称为"非耦合表象".A + B 体系的态可以表成这些基矢的叠加.因此,复合体系的密度矩阵一般也不能表成直积形式 $\rho_{AB} = \rho_A\otimes\rho_B$.)

设 $\hat{Q}_A$ 表示体系 A 的一个可观测量(只与体系 A 的动力学变量有关).如把 A 看成复合体系 A + B 的一部分,则此可观测量应表示为 $\hat{Q} = \hat{Q}_A\otimes\hat{I}_B$,($\hat{I}_B$ 为单位算符,作用于体系 B 的量子态空间).为了描述对一个复合体系的子体系所进行的测量,可以引进约化密度矩阵(reduced density matrix).例如,计算平均值

$$\langle Q\rangle = \mathrm{tr}_{AB}(\rho_{AB}\hat{Q}), \tag{1}$$

在$|a,b\rangle$表象中,

$$\begin{aligned}\langle Q\rangle &= \sum_{a,b}\langle a,b|\rho_{AB}\hat{Q}|a,b\rangle \\ &= \sum_{a,b}\langle a,b|\rho_{AB}\hat{Q}_A\otimes\hat{I}_B|a,b\rangle \\ &= \sum_a\langle a|\sum_b\langle b|\rho_{AB}\hat{I}_B|b\rangle\hat{Q}_A|a\rangle.\end{aligned} \tag{2}$$

定义约化密度矩阵

$$\rho_A^{(r)} = \sum_b\langle b|\rho_{AB}\hat{I}_B|b\rangle = \mathrm{tr}_B(\rho_{AB}), \tag{3}$$

则

$$\langle Q\rangle = \mathrm{tr}_A(\rho_A^{(r)}\hat{Q}_A). \tag{4}$$

7.3.2 EPR 佯谬

1935 年,Einstein,Podolsky 和 Rosen 发表了一篇著名的文章[7]对量子力学理论提出批评,认为:"The ware function (or state vector)

[7] Einstein A, Podolsky B, Rosen N *Can quantum mechanical description of physical reality be considered complete*? Phys. Rev, 1935, **47**: 777.

does not provide a complete description of physical reality",并通过对一些理想实验过程(包括制备和探测)的分析,论证"量子力学不是自洽的".后来人们称之为"EPR 佯谬"(EPR paradox).在过去 60 年中,据统计,有超过 10^6 篇文章讨论此问题.因此,要对此作出什么新的评述,是极其困难的.我们在这里只是为了初学者对此有一个初步的了解,作一个教学上的简单介绍.在这些众多的文章中,必须要提到的是 Bell 不等式的工作[8].本节讲法主要参考了 Cantrell,和 Scully[6],以及 Rosen[9]的文章.

考虑自旋为 1/2 的两个粒子(例如一个电子和一个正电子)组成的体系.设 $t\leqslant 0$ 时刻体系处于自旋单态($S=0, M_S=0$),并为束缚态、质心静止于实验室中(例如电子偶素(positronium)的基态).设 $t=0$ 时刻束缚势被去掉(例如通过光分裂),但过程中未引入角动量来干扰体系的自旋态.这样,体系中的粒子 1 和 2 可沿相反方向自由地运动而互相远离(图 7.3).然后在 $t=t_0>0$ 时刻分别进行下列两种实验:

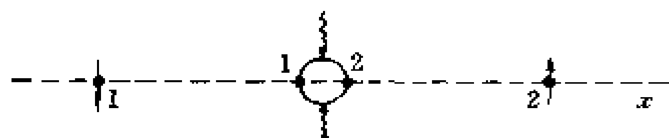


图 7.3

实验 Ⅰ.测量粒子的自旋 z 分量

考虑到自旋单态($S=0, M_S=0$)是各向同性的,$t<t_0$ 时体系的态可以方便地表示成

$$|\psi_{12}(\text{I})\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|z\rangle_1|-z\rangle_2-|-z\rangle_1|z\rangle_2) \tag{5}$$

---

〔8〕 Bell J S. *On the Einstein-Podolsky-Rosen Paradox*. Physics,1965,1:195. *On the Problem of hidden variables in quantum mechanics*. Rev. Mod. Phys.,1966,38:447.

〔9〕 Rosen N *Bell's theorem and quantum mechanics*. Am. J. Phys.,1994,62:109.

($|z\rangle$ 和 $|-z\rangle$ 分别表示 $\sigma_z = \pm 1$ 的本征态，$\sigma_z|z\rangle = |z\rangle$，$\sigma_z|-z\rangle = -|-z\rangle$.)

设 $t = t_0$ 时刻测得粒子 1 处于 $\sigma_z = -1$ 态 $|-z\rangle_1$（"自旋向下"），考虑到自旋 Z 分量 $S_z = S_{1z} + S_{2z}$ 为守恒量，按(5)式，在 $t > t_0$ 后，粒子 2 必然"自旋向上"，即

$$|\psi_2^>(\mathrm{I})\rangle = |z\rangle_2. \tag{6}$$

按 EPR 论证："由于在测量时两个粒子已互相远离，无相互作用，对粒子 1 的观测不会影响到粒子 2 的状态，使之发生改变."（此即"定域性假设"(locality assumption)）. 因此，$t < t_0$ 时刻

$$|\psi_2^<(\mathrm{I})\rangle = |\psi_2^>(\mathrm{I})\rangle = |z\rangle_2, \tag{7}$$

相应的密度算符为

$$\rho_2^<(\mathrm{I}) = |\psi_2^<(\mathrm{I})\rangle\langle\psi_2^<(\mathrm{I})| = |z\rangle_{2\,2}\langle z|. \tag{8}$$

在 Pauli 表象中密度矩阵为

$$\rho_2^<(\mathrm{I}) = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}. \tag{9}$$

实验 II　测量粒子自旋 x 分量

$t < t_0$ 时的自旋单态，同样可以表成

$$|\psi_{12}^<(\mathrm{II})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle_1|-x\rangle_2 - |-x\rangle_1|x\rangle_2). \tag{10}$$

设 $t = t_0$ 时刻测得粒子 $1\sigma_x = -1$（"自旋向下"），即处于 $|-x\rangle_1$ 态. 因此 $t > t_0$ 后，按(10)式，电子 2 将处于

$$|\psi_2^>(\mathrm{II})\rangle = |x\rangle_2. \tag{11}$$

按 EPR 论证，

$$|\psi_2^<(\mathrm{II})\rangle = |\psi_2^>(\mathrm{II})\rangle = |x\rangle_2, \tag{12}$$

而相应的密度矩阵(Pauli 表象)为

$$\rho_2^<(\mathrm{II}) = |\psi_2^<(\mathrm{II})\rangle\langle\psi_2^<(\mathrm{II})| = |x\rangle_{2\,2}\langle x|$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}_2. \tag{13}$$

由此可得出，在 $t < t_0$ 前，同一个体系（粒子 2）的密度矩阵在（Ⅰ），（Ⅱ）两个实验中是不同的，

$$\rho_2^<(\mathrm{I}) \neq \rho_2^<(\mathrm{II}), \tag{14}$$

而测量粒子 1（远离粒子 2）是不会对粒子 2 发生影响的，这就是 EPR 佯谬. 换言之，在测量粒子 1 之前，在实验Ⅰ中粒子 2 处于 $|Z\rangle_2$，在实验Ⅱ中粒子 2 处于 $|x\rangle_2$. 但无论对粒子 1 进行什么样的测量，都不会影响到与它远离的粒子 2 的状态（定域性假设），而按上述论证，粒子 2 的状态却并不相同. 这就是 EPR 佯谬.

7.3.3 EPR 佯谬的密度矩阵解决方案[6].

以下用复合体系的约化密度矩阵理论来理解 EPR 佯谬. 作为两粒子组成的复合体系的一个子体系，粒子 2 的与自旋自由度有关的可观测量总可以表示成

$$\hat{Q}_2 = \sum_{a=0,x,y,z} a_a \sigma_a(2). \tag{15}$$

（σ_0 为 2×2 单位矩阵，σ_x，σ_y 和 σ_z 为 Pauli 矩阵.）在用复合体系的密度矩阵来计算时，可表示成 $\hat{Q} = \hat{I}_1 \otimes \hat{Q}_2$，（$\hat{I}_1$ 为 2×2 单位矩阵）. 其平均值为

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle &= \mathrm{tr}_{12}(\hat{I}_1 \otimes \hat{Q}_2 \rho_{12}) \\ &= \mathrm{tr}_2(\hat{Q}_2 \mathrm{tr}_1(\hat{I}_1 \rho_{12})) \\ &= \mathrm{tr}_2(\hat{Q}_2 \rho_2^{(r)}), \end{aligned} \tag{16}$$

式中

$$\rho_2^{(r)} = \mathrm{tr}_1(\hat{I}_1 \rho_{12}) \tag{17}$$

为约化密度矩阵.

对于上节中考虑的 EPR 实验，

$$\rho_{12}^< = |\psi_{12}^<\rangle\langle\psi_{12}^<|, \tag{18}$$

$$\rho_2^{<(r)} = \mathrm{tr}_1(\hat{I}_1\rho_{12}). \tag{19}$$

对实验Ⅰ,取

$$|\psi_{12}^{<}(\mathrm{I})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z\rangle_1|-z\rangle_2 - |-z\rangle_1|z\rangle_2), \tag{20}$$

$$\begin{aligned}\rho_2^{<(r)}(\mathrm{I}) &= \mathrm{tr}_1(\hat{I}_1\rho_{12}) \\ &= {}_1\langle z|\psi_{12}^{<}(\mathrm{I})\rangle\langle\psi_{12}^{<}(\mathrm{I})|z\rangle_1 \\ &\quad + {}_1\langle -z|\psi_{12}^{<}(\mathrm{I})\rangle\langle\psi_{12}^{<}(\mathrm{I})|-z\rangle_1 \\ &= \frac{1}{2}(|-z\rangle_2\,{}_2\langle -z| + |z\rangle_2\,{}_2\langle z|).\end{aligned} \tag{21}$$

在 Pauli 表象中,

$$\rho_2^{(r)}(\mathrm{I}) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}_2. \tag{22}$$

对实验Ⅱ,取

$$|\psi_{12}^{<}(\mathrm{II})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle_1|-x\rangle_2 - |-x\rangle_1|x\rangle_2) \tag{23}$$

$$\begin{aligned}\rho_2^{<(r)}(\mathrm{II}) &= \mathrm{tr}_1(\hat{I}_1\rho_{12}^{<}) \\ &= {}_1\langle x|\psi_{12}^{<}(\mathrm{II})\rangle\langle\psi_{12}^{<}(\mathrm{II})|x\rangle_1 \\ &\quad + {}_1\langle -x|\psi_{12}^{<}(\mathrm{II})\rangle\langle\psi_{12}^{<}(\mathrm{II})|-x\rangle_1 \\ &= \frac{1}{2}(|-x\rangle_2\,{}_2\langle -x| + |x\rangle_2\,{}_2\langle x|),\end{aligned} \tag{24}$$

在 Pauli 表象中,

$$\rho_2^{<(r)}(\mathrm{II}) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}_2. \tag{25}$$

可以看出,

$$\rho_2^{<(r)}(\mathrm{I}) = \rho_2^{<(r)}(\mathrm{II}). \tag{26}$$

并不出现矛盾．以上即 Cantrell 和 Scully 用约化密度矩阵概念来理解 EPR 佯谬的方案．其关键在于区分对一体系的测量是"完备

的"还是"不完备"的．特别是对于一个由两个子体系组成的体系，如把它看成一个复合体系而去测量其中一个子体系，则测量是不完备的，所得结果不是一个纯态，需要用约化密度矩阵来描述．

例如考虑图 7.3 所示两个粒子组成的体系．在两个粒子之间的束缚势去掉之前(即两个粒子有相互作用)．体系处于束缚定态，即电子偶素的基态，总自旋 $S=0$.(实际上，除了具有确定能量 E 之外，电子偶素基态的总轨道角动量 $L=0$，总角动量 $J=0$)．对于任意空间旋转，体系的量子态是不变的(各向同性)．此时，作为复合体系的 $S=0$ 的态(空间旋转不变)是有实际意义的，对粒子 2 进行测量的结果当然与粒子 1 所处状态有关．这一点，大家无异议．但当两个粒子之间的束缚势去掉之后，体系的 Hamilton 量已发生改变，原来体系的定态，现在不再是定态．这表现在两个粒子在空间的概率分布是随时间变化的．在保证没有角动量引入的前提下，$S=0$ 态可以保持．但试问，当两个粒子彼此相离极远的情况下，作为 $S=0$ 态的复合体系，有无实际意义？(例如要求体系整体作空间旋转)．当然，从概念上讲，不妨把它们看成 $S=0$ 的复合体系，采取被动方式进行空间旋转(即旋转参照系，体系保持不动)．在此情况下，对单个粒子进行的测量，从复合体系角度来看，就是不完备测量，因而必须用约化密度矩阵来描述．这样，EPR 佯谬就可得以克服．

7.3.4 自旋单态下的二电子的极化关联．

设 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}$ 为任意两个方向的单位矢量，夹角为 θ，即 $(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})=\cos\theta$．考虑处于自旋单态下的二电子体系，分析电子 1 的自旋沿 $\boldsymbol{a}$ 方向分量 $(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})$ 与电子 2 的自旋沿 $\boldsymbol{b}$ 方向分量 $(\vec{\boldsymbol{\sigma}}_2\cdot\vec{\boldsymbol{b}})$ 的测值的关联，即极化关联．可以证明，按照量子力学理论，在自旋单态下，$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})$ 的平均值为

$$\langle(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})\rangle=-(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}) \tag{27}$$

证明如下：

考虑到自旋单态的各向同性,可以方便地表示成

$$|\psi_{12}(S=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z\rangle_1|-z\rangle_2 - |-z\rangle_1|z\rangle_2). \qquad (28)$$

其中 z 轴方向不妨就取为 $\boldsymbol{a}$ 方向,于是$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b}) = \sigma_{1z}\sigma_{2z}\cos\theta$.而

$$\begin{aligned}
&\langle\psi_{12}(S=0)|(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})|\psi_{12}(S=0)\rangle \\
&= \frac{1}{2}\{(\underset{2}{\langle}-z|\underset{1}{\langle}z| - \underset{2}{\langle}z|\underset{1}{\langle}-z|) \\
&\quad\times\sigma_{1z}\sigma_{2z}\cos\theta(|z\underset{1}{\rangle}|-z\underset{2}{\rangle} - |-z\underset{1}{\rangle}|z\underset{2}{\rangle})\} \\
&= \frac{1}{2}\cos\theta(\underset{1}{\langle}z|\sigma_{1z}|z\underset{1}{\rangle}\underset{2}{\langle}-z|\sigma_{2z}|-z\underset{2}{\rangle} \\
&\quad+\underset{1}{\langle}-z|\sigma_{1z}\ -z\underset{1}{\rangle}\underset{2}{\langle}z|\sigma_{2z}|z\rangle) \\
&= \frac{1}{2}\cos\theta(-1-1) = -\cos\theta = -(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}).
\end{aligned}$$

例如,$\boldsymbol{a}=\boldsymbol{b}$,则$\langle(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{a})\rangle = -1$,即沿任何给定方向,$\boldsymbol{\sigma}_1$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_2$ 的分量取值必定异号("自旋取向相反"),这是自旋单态的特征.反之,若 $\boldsymbol{a}\perp\boldsymbol{b}$(互相垂直),则$\langle(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})\rangle = 0$.

7.3.5 Bell 不等式

Bell 在他的一篇著名的文章中[8]换了一个方式来讨论 EPR 佯谬.其论证基于定域性假定(locality assumption)和隐变量(hidden variables)假定.所谓定域性,是指"对一个体系的测量,不会影响到与之远离的另一个体系的测量结果,因为两个体系无相互作用".为简化论证,Bell 考虑自旋为 1/2 的两个粒子组成的体系,处于自旋单态,并假定两粒子离开很远,无相互作用.假设 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 表示空间任何方向的两个单位矢.测量粒子 1 的自旋沿 $\boldsymbol{a}$ 方向的分量$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})$可能值为 ±1(Stern – Gerlach 实验).同样,测粒子 2 的自旋沿 $\boldsymbol{b}$ 方向的分量$(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})$的可能取值也只能是 ±1.

按照量子力学理论,在单态下,如测$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})$得 $+1$,则测$(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot$

$\boldsymbol{a}$)结果必为 -1,彼此有完全确定的关联. 但另一方面,按照量子力学的统计诠释,自旋单态波函数只是一个概率幅,它并不能确定对单独一个粒子进行一次测量的结果. Bell 认为,这就意味着一种可能性,即"对态做更完全的描述". 为此他引进隐变量 λ. 假定:

测量($\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a}$)的结果由 $\boldsymbol{a}$ 和 λ 决定,$A(\boldsymbol{a},\lambda)=\pm1$,但 $A(\boldsymbol{a},\lambda)$ 不依赖于 $\boldsymbol{b}$.(这就是定域性假定.)同样,测量($\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b}$)的结果由 $\boldsymbol{b}$ 和 λ 决定,$B(\boldsymbol{b},\lambda)=\pm1$,但 $B(\boldsymbol{b},\lambda)$ 不依赖于 $\boldsymbol{a}$. 设隐变量的概率分布为 $\rho(\lambda)$,则 $\int\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda=1$. 然后,他定义一个关联函数

$$P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})=\int\mathrm{d}\lambda\rho(\lambda)A(\boldsymbol{a},\lambda)B(\boldsymbol{b},\lambda) \tag{29}$$

表征($\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a}$)($\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b}$)的平均值. $\rho(\lambda)$ 也不依赖于 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{b}$.

考虑另外两个任意方向的单位矢量 $\boldsymbol{c}$ 和 $\boldsymbol{d}$,则

$$\begin{aligned}P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})-P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{c})&=\int\mathrm{d}\lambda\rho(\lambda)[A(\boldsymbol{a},\lambda)B(\boldsymbol{b},\lambda)\\&\quad-A(\boldsymbol{a},\lambda)B(\boldsymbol{c},\lambda)]\\&=\int\mathrm{d}\lambda\rho(\lambda)\{A(\boldsymbol{a},\lambda)B(\boldsymbol{b},\lambda)\\&\quad\times[1\pm A(\boldsymbol{d},\lambda)B(\boldsymbol{c},\lambda)]\}\\&\quad-\int\mathrm{d}\lambda\rho(\lambda)\{A(\boldsymbol{a},\lambda)B(\boldsymbol{c},\lambda)\\&\quad\times[1\pm A(\boldsymbol{d},\lambda)B(\boldsymbol{b},\lambda)]\}.\end{aligned} \tag{30}$$

考虑到 $A(\boldsymbol{a},\lambda)B(\boldsymbol{b},\lambda)\leqslant1$,$A(\boldsymbol{a},\lambda)B(\boldsymbol{c},\lambda)\geqslant-1$,由上式可得出

$$\begin{aligned}|P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})-P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{c})|&\leqslant\int\mathrm{d}\lambda\rho(\lambda)[1\pm A(\boldsymbol{d},\lambda)B(\boldsymbol{c},\lambda)]\\&\quad-\int\mathrm{d}\lambda\rho(\lambda)[1\pm A(\boldsymbol{d},\lambda)B(\boldsymbol{b},\lambda)],\end{aligned} \tag{31}$$

即

$$|P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})-P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{c})|\leqslant\{2\pm[P(\boldsymbol{d},\boldsymbol{c})+P(\boldsymbol{d},\boldsymbol{b})]\}. \tag{32}$$

试取 $\boldsymbol{d}=\boldsymbol{c}$,考虑到对于自旋单态,$A(\boldsymbol{c},\lambda)=-B(\boldsymbol{c},\lambda)$,有 $P(\boldsymbol{c},$

$\boldsymbol{c})=-1$,于是

$$|P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})-P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{c})|\leqslant\{2\pm(-1)+P(\boldsymbol{c},\boldsymbol{b})\}. \tag{33}$$

考虑到 $-1+P(\boldsymbol{c},\boldsymbol{b})\leqslant 0$, $P(\boldsymbol{c},\boldsymbol{b})=P(\boldsymbol{b},\boldsymbol{c})$,上式化为

$$\begin{aligned}|P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})-P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{c})| &\leqslant 2+[-1+P(\boldsymbol{c},\boldsymbol{b})]\\ &=1+P(\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}),\end{aligned}$$

即

$$|P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})-P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{c})|\leqslant 1+P(\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}). \tag{34}$$

此即 Bell 不等式,式中 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}$ 为任意方向的单位矢量.

Bell 的文章发表后,引起人们很大兴趣,有关的大量文献,可在 Khalfin 和 Tsirelson[10]的文章中找到.特别值得注意的是,Aspect 等[11]通过 Ca 原子的级联跃迁所发射出的光子的线偏振关联的观测,证实量子力学的预言是正确的,而与 Bell 不等式不一致,因而认为定域性假定是不成立的.关于这方面,也有很多文章进行讨论,不能在此详述,读者可参阅 Popescu 的文章[12]及所引文献.N. Rosen[9]沿与 Bell 论证相反的思路进行分析后指出:如现行量子力学理论正确,则定域性假定不成立.

7.3.6 Rosen 的论证

Rosen 从另一角度来讨论 Bell 不等式所提出的问题[9].为便于分析电子自旋极化关联,假设隐参数 λ 取分立值 k.此时

$$P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})=\sum_k\rho_k A_k(\boldsymbol{a})B_k(\boldsymbol{b}), \tag{35}$$

式中 $A_k(\boldsymbol{a})$与 $\boldsymbol{b}$ 无关,$B_k(\boldsymbol{b})$与 $\boldsymbol{a}$ 无关,ρ_k 与 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 无关,此即定域性假定.Rosen 完全按照量子力学理论来讨论,结果表明 $\rho_k=\rho_k(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$与 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}$ 有关,因而论证量子力学理论与定域性假定是矛盾的.论证如下:

---

[10] Khalfin L, Tsirelson B. Found. Phys., 1992, **22**: 879.

[11] Aspect A, Grangier P, Roger G. Phys. Rev. Lett., 1981, **47**: 460; 1982, **49**: 91; Aspect A, Dalibard J, Roger G. Phys. Rev. Lett., 1982, **49**: 1804.

[12] Popescu S. Phys. Rev. Lett., 1995, **74**: 2619.

考虑空间(θ,φ)方向的单位矢 $\boldsymbol{n}=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$.电子自旋 $\boldsymbol{s}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ 沿 $\boldsymbol{n}$ 方向分量为(取 Pauli 表象)

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix} \tag{36}$$

容易证明,$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})^2=1$,$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})$的本征值为$\pm1$,本征态分别记为$|\boldsymbol{n}\rangle$和$|-\boldsymbol{n}\rangle$,$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})|\boldsymbol{n}\rangle=|\boldsymbol{n}\rangle$,$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})|-\boldsymbol{n}\rangle=-|-\boldsymbol{n}\rangle$. 在球坐标表象中,本征态表示为

$$|\boldsymbol{n}\rangle=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{pmatrix},\quad |-\boldsymbol{n}\rangle=\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}. \tag{37}$$

自旋为1/2的两个粒子组成的体系的自旋力学量完全集通常取为(s_{1z},s_{2z})或(S^2,S_z),$(S=s_1+s_2)$. 以$(s_{1z}s_{2z})$的本征矢为基矢的表象称为非耦合表象．以(S^2,S_z)的本征矢为基矢的表象称为耦合表象．自旋单态就是(S^2,S_z)的共同本征态$(S=0,M_S=0)$.通常习惯用非耦合表象来展开如下:

$$|\psi_{12}(S=0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}[|z\rangle_1|-z\rangle_2-|-z\rangle_1|z\rangle_2]. \tag{38}$$

事实上,还可以推广,取$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})$和$(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})$的共同本征矢作为非耦合表象的基矢,即

$$\begin{aligned}
|\psi_1\rangle&=|\boldsymbol{a}\rangle_1|\boldsymbol{b}\rangle_2,\text{相当于}\ A_1=B_1=1,\\
|\psi_2\rangle&=|\boldsymbol{a}\rangle_1|-\boldsymbol{b}\rangle_2,\qquad A_2=-B_2=1,\\
|\psi_3\rangle&=|-\boldsymbol{a}\rangle_1|-\boldsymbol{b}\rangle_2,\qquad A_3=B_3=-1,\\
|\psi_4\rangle&=|-\boldsymbol{a}\rangle_1|\boldsymbol{b}\rangle_2,\qquad A_4=-B_4=-1,
\end{aligned} \tag{39}$$

可以看出,$A_kB_k=(-1)^{k+1}$,$k=1,2,3,4$.

下面我们以这一组非耦合表象的基矢来展开自旋单态,

$$|\psi_{12}(S=0)\rangle=\sum_{j=1}^{4}C_j|\psi_j\rangle, \tag{40}$$

式中　$C_j=\langle\psi_j|\psi_{12}(S=0)\rangle$如下：

$$
\begin{aligned}
C_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\cos\frac{\theta_a}{2}\sin\frac{\theta_b}{2}e^{i(\varphi_a-\varphi_b)/2} \\
&\quad - \sin\frac{\theta_a}{2}\cos\frac{\theta_b}{2}e^{-i(\varphi_a-\varphi_b)/2}\Big], \\
C_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\cos\frac{\theta_a}{2}\cos\frac{\theta_b}{2}e^{i(\varphi_a-\varphi_b)/2} \\
&\quad + \sin\frac{\theta_a}{2}\sin\frac{\theta_b}{2}e^{-i(\varphi_a-\varphi_b)/2}\Big], \\
C_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[-\sin\frac{\theta_a}{2}\cos\frac{\theta_b}{2}e^{i(\varphi_a-\varphi_b)/2} \\
&\quad + \cos\frac{\theta_a}{2}\sin\frac{\theta_b}{2}e^{-i(\varphi_a-\varphi_b)/2}\Big], \\
C_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[-\sin\frac{\theta_a}{2}\sin\frac{\theta_b}{2}e^{i(\varphi_a-\varphi_b)/2} \\
&\quad - \cos\frac{\theta_a}{2}\cos\frac{\theta_b}{2}e^{-i(\varphi_a-\varphi_b)/2}\Big].
\end{aligned} \tag{41}
$$

可以求出

$$
\begin{aligned}
|C_k|^2 &= \frac{1}{4}[1+(-1)^k(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})], \\
(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}) &= \cos\theta_a\cos\theta_b+\sin\theta_a\sin\theta_b\cos(\varphi_a-\varphi_b).
\end{aligned} \tag{42}
$$

利用(40)式，得

$$
\begin{aligned}
&(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})|\psi(S=0)\rangle \\
&= \sum_{j=1}^{4}(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})C_j|\psi_j\rangle \\
&= \sum_j C_j(-1)^{j+1}|\psi_j\rangle,
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) &= \langle\psi_{12}(S=0)|(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})|\psi_{12}(S=0)\rangle \\
&= \sum_{kj}C_k^*(-1)^{j+1}C_j\langle\psi_k|\psi_j\rangle
\end{aligned}
$$

$$= -\sum_k (-1)^k |C_k|^2. \tag{43}$$

但按 Bell 定义，

$$P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) = \sum_k \rho_k A_k(\boldsymbol{a}) B_k(\boldsymbol{b}) = \sum_k \rho_k (-1)^{k+1}. \tag{44}$$

比较(43),(44)式，并利用(42)式，得

$$\rho_k = |C_k|^2$$

$$= \frac{1}{4}[1 + (-1)^k(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})]. \tag{45}$$

显然，ρ_k 依赖于 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{b}$，所以与定域性假设矛盾．

利用(45)式代入(35)式，可以得出

$$P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) = -(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}). \tag{46}$$

与 §7.3.4 的简单计算得出(27)式一致．

8 粒子全同性与波函数的置换对称性

8.1 全同性概念

历史上,早在古希腊哲学家 Aristotle 和原子论者的学说中,已提出了"全同实体"(identical entities)的概念[1].在 19 世纪 Dalton 的原子论中,已提出:"所有均匀物体的终极组成粒子是完全相同的"(The ultimate particles of all homogeneous bodies are perfectly alike.)在经典物理学中也已涉及粒子全同性的问题.例如著名的 Gibbs 佯谬:设有两种不同的气体,分别置于用隔板 AB 分开的箱子的两侧(图 8.1),体积各为 $V/2$,压强 p 及温度 T 相同.设想,把隔板 AB 抽开,则两种气体分子将互相混合,最后达到平衡.可以证明[2],熵增加为

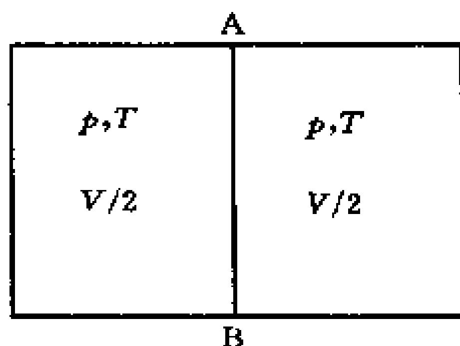


图 8.1

$$\Delta S = \left(\frac{pV}{T}\right)\ln 2 \tag{1}$$

试问:如箱内两侧是完全相同的气体分子,熵是否增加? 从物理上讲,显然熵不会增加($\Delta S = 0$).此时应如何理解(1)式给出的结果? 问题出在什么地方?

---

[1] Pesić P D. Am. J. Phys., 1991, 59: 971.

[2] 例如,参阅:Mandel F. *Statistical Physics*. Manchester: Manchesten University Press, 1971.131.

M. Planck 对此做了如下解释[1]. 他认为:"两种气体在化学上的差异不能用一个连续变量来描述. 对此, 人们只能说它们或者相同, 或者不同, 这是一种不连续的关系"(The chemical difference of two gases can not be represented by a continuous variable, ... We can speak only of a discontinuous relation, either of equality, or inequality".) 经过仔细分析, 他认为"全同性"(identicality)包含有两重含义, 即

1° 相等性(equality),

2° 不可分辨性(indistinguishability).

并指出, 在 Boltzmann 统计中所处理的粒子只具有 1°, 而不包含 2°, 即"这些粒子在内禀属性上完全相同, 但各自具有不同轨道, 从这个意义上讲, 它们是可以分辨的"(..."Particles are perfectly equal in their innate properties but still distinguishable in the sense of each having a distinct trajectory",) 而 Fermi 统计和 Bose 统计所处理的粒子则具有全同性的上述两方面的性质. 这种差别明显表现在基本的统计法中. 例如一个近独立的 N 粒子体系, 分别有 $n_1, n_2, \cdots$ ($\sum_i n_i = N$ 固定)个粒子处于单粒子能级 $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots$ 上($\sum_i n_i \varepsilon_i = E$ 取定), 各单粒子能级的简并度分别为 $f_1, f_2, \cdots$, 则此 N 粒子体系的态的数目 W 分别为

Boltzmann 统计

$$W = \frac{N!}{\prod_i n_i!} \prod_i (f_i)^{n_i}, \tag{2}$$

Fermi 统计

$$W = \prod_i \binom{f_i}{n_i} = \prod_i \frac{f_i!}{n_i!(f_i - n_i)!}, (n_i \leqslant f_i, \text{Pauli 原理}) \tag{3}$$

Bose 统计

$$W = \prod_i \binom{f_i + n_i - 1}{n_i} = \prod_i \frac{(f_i + n_i - 1)!}{n_i!(f_i - 1)!}, (n_i \text{不限}). \tag{4}$$

可以看出, 由于"全同性"的限制, N 粒子体系的可能状态的数目

一般要减少,

$$W_{\text{Boltzmann}} \geqslant W_{\text{Bose}} \geqslant W_{\text{Fermi}}. \quad (5)$$

应该提到,在量子力学建立之前,就已提出 Bose 统计和 Fermi 统计.在量子力学建立后,Heisenberg 等[3]从量子态的置换对称性来论证了 Bose 统计和 Fermi 统计.设全同粒子系的量子态用波函数

$$\psi(q_1, q_2, \cdots q_i, \cdots q_j, \cdots) \quad (6)$$

描述,q_i 表示第 i 个粒子的全部坐标.用交换算符 $P_{ij}(i \neq j = 1,2,\cdots)$运算,得

$$P_{ij}\psi(\cdots q_i, \cdots q_j, \cdots) = \psi(\cdots q_j \cdots q_i \cdots). \quad (7)$$

考虑到粒子的全同性,$P_{ij}\psi$ 所描述的量子态与 ψ 没有任何差别(i,j 粒子不可分辨),因为它们所预言的一切观测结果都相同.所以

$$P_{ij}\psi = \lambda\psi \quad (8)$$

λ 为常数因子.考虑到 $P_{ij}^2\psi = \lambda P_{ij}\psi = \lambda^2\psi$,另一方面 $P_{ij}^2\psi \equiv \psi$,所以 $\lambda^2 = 1$,即 $\lambda = \pm 1$.即全同粒子系的波函数必为对称($\lambda = 1$)或反对称($\lambda = -1$).

8.2 全同粒子系波函数的置换对称性是否量子力学的一条基本原理

Блохинцев[4]等把全同性和波函数的置换对称性看成量子力学的基本原理之一.与此相反,Landau, Feynman, Weisskopf 等则认为全同性只不过是一种对称性,而波函数的对称或反对称则只是全同性导致的一个推论.例如,Landau 和 Lifshitz 提到[5]:"由于

---

[3] Heisenberg W. Z. Physik, 1926, **38**: 411; 1926, **39**: 499. Fermi E. Z. Physik, 1926, **36**: 902. Dirac P A M. Proc. Roy. Soc. (London), 1926, **A112**: 661.

[4] Блохинцев Д И. *Основы Квантовой Механики* Москва: Государственной издательство《Высшая школа》, 1949.

[5] Landau L D, Lifshitz E M. *Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory*. 3rd. ed. New York: Pergamon Press, 1977. 225.

测不准关系，一个电子运动轨道的概念不再成立"，因而导致"电子的不可分辨性". Feynman 明确指出[6]，"identicality"是"a beautiful consequence of quantum mechanics". Weisskopf 也明确提出[7]："identicality"是"a crucial result of quantum theory"，"a consequence rather than a fundamental principle".

我们认为，后一种看法较为妥当. 但需要更仔细加以论证. 其中有些重要概念在过去量子力学教材和专著中都没有明确交待. 论证如下：

(1) 对于全同粒子组成的量子力学体系，显然

$$[P_{ij}, \hat{H}] = 0 \tag{1}$$

$\hat{H}$ 为体系的 Hamilton 量，因此所有 $P_{ij}(i \neq j = 1, 2, \cdots, N)$ 均为守恒量. 但守恒量概念，在量子力学中与经典力学有所不同：(a)量子体系的守恒量并不一定取确定值，即体系的量子态并不一定是守恒量的本征态，这要视初值条件而定. (b)不是所有守恒量都可以同时取确定值. 一般说来，体系的量子态并非所有守恒量的共同本征态.

根据(a)，P_{ij}守恒并不能保证全同粒子系处于 P_{ij}的本征态，即不能保证量子态对 P_{ij}具有不变性，除非在初始时刻($t=0$)体系处于 P_{ij}的本征态，即如果

$$P_{ij}\psi(t=0) = \lambda\psi(t=0), \tag{2}$$

则在以后任何时刻 $\psi(t)$都是 P_{ij}的本征态，因为利用(1)式，

$$\begin{aligned} P_{ij}\psi(t) &= P_{ij}e^{-iHt/\hbar}\psi(0) \\ &= e^{-iHt/\hbar}P_{ij}\psi(0) = \lambda e^{-iHt/\hbar}\psi(0) \\ &= \lambda\psi(t). \end{aligned} \tag{3}$$

---

[6] Feynman R P. *Lectures on Physics*, Ⅲ. Massachusetts: Addison-Wesley, 1965. § 3-4, 3-9.

[7] Weisskopf V F. *Physics in the Twentieth Century*. Cambridge, MA.: MIT. Press, 1972. 24～51, 295～297.

但有什么理由要求 $\psi(0)$ 一定具有 P_{ij} 交换不变性?

(2) 置换群是非 Abel 群,各置换并不一定对易.例如 $[P_{12}, P_{13}] \neq 0$.因此,一般说来,全同粒子系的波函数不可能是所有 $P_{ij}(i \neq j = 1,2,\cdots)$ 的共同本征态.设想 ψ 是 P_{12} 的本征态(对 $1\leftrightarrow2$ 对换,具有不变性),而不是 P_{13} 的本征态(对 $1\leftrightarrow3$ 对换,不具有不变性),这样我们将遇到下列矛盾:(a)粒子 2 和粒子 3 所处地位不同,(b)可以区分粒子 2 和粒子 3,这与全同性概念是矛盾的.因此,唯一可能的选择是:"ψ 是所有 $P_{ij}(i \neq j = 1,2,\cdots)$ 的共同本征态".但这是否可能?

(3)按照测不准关系,体系的两个力学量 A 和 B 的不确定度满足

$$\Delta A \cdot \Delta B \geqslant \frac{1}{2}\left|\overline{[A, B]}\right|. \tag{4}$$

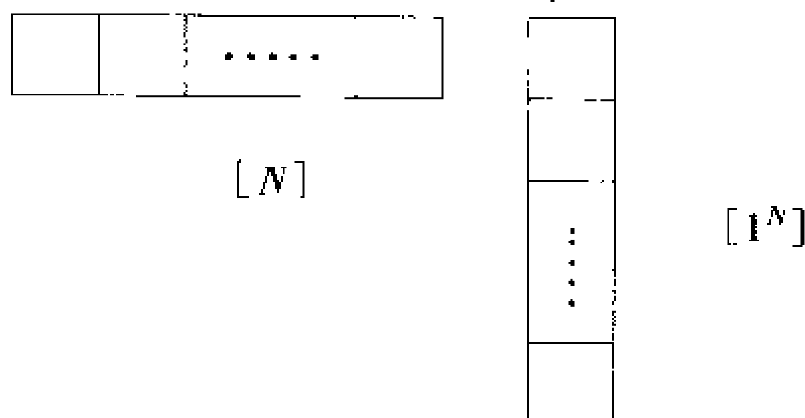
因此,若 $[A, B] \neq 0$,则一般说来,A 与 B 不可能具有共同本征态(除非在某特殊状态下 $\overline{[A, B]} = 0$).现在问题是:对于全同粒子系,是否存在这样的特殊状态,使下式成立

$$\overline{[P_{ij}, P_{kl}]} = 0, (i \neq j = 1,2,\cdots,N; k \neq l = 1,2,\cdots,N). \tag{5}$$

回答是肯定的.但只有两种状态满足此要求,即完全对称态和完全反对称态.它们分别是置换群的两个一维表示的基矢,即

完全对称表示 $[N]$ 的基矢,记为 ψ^{S}.

完全反对称表示 $[1^N]$ 的基矢,记为 ψ^{A}.



按照其它 Young 图所标记的不可约表示而变换的全同粒子系的量子态,都与全同性概念抵触而不可能在自然界中观测到.这样,我们就从量子力学基本原理出发解释了为什么全同粒子系的波函数,对于所有置换,或者对称,或者反对称.

但是,对于某一类全同粒子,波函数究竟应该是置换对称($\lambda = +1$),还是反对称($\lambda = -1$)? 从所有实验资料的分析来看,波函数的置换对称性与粒子自旋 s 有确定的关系,即

$$\lambda = (-1)^{2s}, \tag{6}$$

即对于 s = 整数(0,1,2,⋯)的粒子,$\lambda = +1$,称为 Bose 子,而对于 s = 半奇数(1/2,3/2,⋯)的粒子,$\lambda = -1$,称为 Fermi 子.

在量子场论中,Pauli 曾经基于 Lorentz 不变性和因果性(causality)假定,对此进行过论证.分析表明,对于 s = 整数的粒子场(Bose 场),必须用对易关系进行量子化,即要求粒子产生和湮灭算符满足下列对易式

$$[a_i, a_j^\dagger] \equiv a_i a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i = \delta_{ij}$$

$$[a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0, \quad i, j = 1, 2, \cdots,$$

而对于 s = 半奇数的粒子,必须用反对易式进行量子化,即

$$[a_i, a_j^\dagger]_+ \equiv a_i a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i = \delta_{ij}$$

$$[a_i, a_j]_+ = [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_+ = 0, \quad i, j = 1, 2, \cdots$$

否则将违反因果律.

8.3 全同性的进一步讨论

8.3.1 全同性与态量子化

Weisskopf 曾经指出[8]:粒子全同性概念是建立在粒子内禀态

[8] Weisskopf V F. *The role of symmetry in nuclear, atomic, and complex structures*. in: Engström A, Stranberg B ed. Nobel Symposium 11. New York: John Wiley & Sons, 1968.

的量子化的基础上的.

在经典物理学中,由于宏观物体的力学量及各种属性(形状,大小,质量等)可以连续变化,人们总可以找到两个物体的微小差异.实际上,没有两个宏观物体(例如两个星体,两个人的指纹)可以谈得上"全同".两个宏观物体的性质,尽管可以任意地接近,但完全相同的几率是非常小的.而且,在经典物理学中,即使承认两个粒子全同,人们还可以根据它们的不同运动轨道来区分它们.正是因为这一点,在经典物理中,即使考虑全同性(实际上只是Planck所说的"相等性"(equality)),也得不出什么本质上新的结论.

与此不同,在量子力学中,考虑到微观客体的波动粒子两重性(表现为测不准关系),粒子运动轨道的概念失去意义.这就导致了"不可分辨性"(indistinguishability),这是"全同性"的核心.另一方面,波动粒子两重性在一定条件下(例如束缚定态)还会导致态量子化.处于分立量子态的两个体系,其性质或者全同(同一量子态),或者完全不同(不同的量子态),中间并无连续的过渡.例如两个银原子,不管它们是通过什么工艺过程制备出来的,在常温情况下,银原子总是处于基态,它们都具有完全相同的空间构形和各种属性,可以称得上"全同".

既然全同性依赖于态的量子化,而一个体系的能级的量子化,是否应该予以考虑,依赖于所处环境及所讨论的过程.通常人们谈到原子的全同性,是基于常温下原子热运动能量远小于其内部激发能,$kT \ll (E_1 - E_0)$,E_0是原子基态能量,E_1是第一激发态能量,此时原子内部运动实际上完全冻结,所有原子实际上都处于基态,因而可以视为"全同".可以想到,在高温情况下,例如 $T \sim 10^6$K ($kT \sim 10$eV),原子将有一定概率处于激发态,而不同原子可以处于不同的激发态,此时很难说两个原子一定"全同",因而把它们视为"全同"来讨论其"全同性"导致的影响,就没有多大实际价值.对于分子,特别是生物大分子,由于它们的激发(振动,转动等)能级

很低,即使在常温下,分子也可能有一定概率处于激发态,此时讨论它们之间的"全同性"及其所产生的影响就没有多大意义.

8.3.2 全同性是可观测量

应该强调,全同性并非只是一个抽象的概念,而是一个可观测量.前面已提到,由于粒子的全同性,全同多粒子系的状态要受到很强的限制,并导致不同的统计规律(Bose 统计或 Fermi 统计).全同性作为一个可观测量,相应的守恒量即统计性.这里强调的是对极大量全同粒子组成的体系的统计性质.例如液氦(^4He)在极低温下出的 Bose 凝聚.但全同性的表现是极为广泛的,有很多新的现象和领域还有待人们去探索.以下就一些人们已有较深了解的问题再加以讨论.

全同性可以导致粒子之间一种新的作用力,即交换力,是一种量子效应,无经典对应.如果没有这种交换力,人们就很难理解宇宙中稳定存在的这样多分子.例如两个电子,如它们的自旋平行(或者说处于自旋三重态),则其空间相对运动波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$对于 $\boldsymbol{r}_1\leftrightarrow\boldsymbol{r}_2$ 交换,$\boldsymbol{r}=(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)\rightarrow-\boldsymbol{r}$,必须反对称,$\psi(-\boldsymbol{r})=-\psi(\boldsymbol{r})$.因此 $\psi(0)=0$,即两个电子在空间位置重叠的几率为 0.这表现为粒子之间有一种排斥力,以阻止两个粒子靠近.这也是 Pauli 原理在坐标表象中的表现.与此相反,如两个电子自旋反平行(自旋单态),则两个电子的空间相对运动波函数必须对于 $\boldsymbol{r}_1\leftrightarrow\boldsymbol{r}_2$ 交换对称.在此情况下,不仅 $\psi(0)\neq0$,而且两个电子靠近的概率很大,形成一种稳定的空间构形,这就是共价键形成的机制,是量子理论的重大成就之一.

再考虑 H_2 分子的转动谱.氢原子核(即质子)的自旋为 1/2,是 Fermi 子.当两个原子核空间坐标交换时,$\boldsymbol{R}_1\leftrightarrow\boldsymbol{R}_2$,它们的相对坐标 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{R}_1-\boldsymbol{R}_2\rightarrow-\boldsymbol{R}$,相应的球坐标 $R\rightarrow R,\theta\rightarrow\pi-\theta,\varphi\rightarrow\pi+\varphi$,因此空间转动波函数 $Y_{LM}(\theta,\varphi)\rightarrow Y_{LM}(\pi-\theta,\pi+\varphi)=(-1)^LY_{LM}(\theta,\varphi)$.考虑到整个波函数(自旋·空间部分)的交换反

对称性,当 H_2 分子的两个氢原子核处于自旋单态($S=0$,仲氢)时,L 必为偶数 0,2,4,…,而处于自旋三重态($S=1$,正氢)时,$L=1,3,5,\cdots$.考虑到两个原子核之间作用力的主要部分与自旋无关,自旋 S 可视为近似好量子数.在光跃迁过程中,正氢分子和仲氢分子来不及转化.自然界中正氢与仲氢分子数目之比为3:1,因此正氢分子转动谱线强度为仲氢的3倍,形成氢分子转动谱线明暗交替的现象,这已为实验证实.[9]

[9] 参阅:曾谨言.量子力学 卷Ⅰ.北京:科学出版社,1990.635.

9 一维势阱的束缚能级与透射振幅的极点

一般量子力学教材中,对于一维势阱的束缚态问题和透射问题,往往在不同章节中分别按不同的边条件求解不含时Schrödinger方程来处理.初学者很少把它们联系起来.三维势场的束缚态与散射振幅的极点的关系,在一些专著中已有详细讨论[1].散射振幅作为粒子能量(动量)的函数,如解析延拓到复 k 平面上,就会发现,束缚能级位置所在[注],正是散射振幅极点.但反之不一定成立.

为弥补一般教材的不足,以下就一些常见势阱,先求出其透射振幅,然后解析延拓到复 k 平面(正虚轴上),找出其极点位置,并与束缚能级比较,以加深初学者对两类问题的密切关系的印象.

9.1 δ势

考虑质量为 m 的粒子,处于 δ 势阱中

$$V(x) = -\gamma\delta(x),(\gamma > 0), \tag{1}$$

---

〔1〕 例如,Newton R G. *Scattering Theory of Waves and Particles*. New York: McGraw-Hill,1966. Nussenzweig H M. *Causality and Dispersion Relation*. New York: Academic Press, 1972. Sprung D W L, Wu H. Am. J. Phy., 1996, **64**: 136.

〔注〕 S(散射)矩阵作为复能量或复动量(波数 k)的解析函数,研究其解析性质表明:S 在动量正虚轴上的极点对应于束缚态,在负虚轴上的极点对应于虚态(virtual state)或称反束缚态(anti-bound state),是不能归一化的.复 k 平面的极点对应于共振态(极点位置的虚部决定共振能级宽度).对于一维散射,S 矩阵只包含两个元素,即透射振幅和反射振幅.

Schrödinger 方程可表示为

$$\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E + \gamma\delta(x))\psi(x). \tag{2}$$

在 $x \neq 0$ 处，上式化为

$$\psi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x). \tag{3}$$

在 $x = 0$ 点 $\psi(x)$连续，但不可微.(2)式两侧对 x 积分，$\lim\limits_{\varepsilon \to 0^+}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx$，得

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0), \tag{4}$$

此即 $\psi'(x)$跃变的条件[2]. 以下先讨论束缚态，然后讨论散射态与束缚态的关系.

束缚态($E < 0$)

在 $x \neq 0$ 处，束缚态形式为 $\psi(x) \sim e^{\pm\beta x}$，$\beta = \sqrt{-2mE}/\hbar$. 考虑到 δ 势的反射对称性，$V(-x) = V(x)$，而一维束缚态是不简并的，所以它们必具有确定的宇称.

先讨论偶宇称态. 波函数形式为

$$\psi(x) = \begin{cases} Ce^{-\beta x}, & x > 0 \\ Ce^{\beta x}, & x < 0 \end{cases} \tag{5}$$

代入跃变条件(4)，可得出 $\beta = m\gamma/\hbar^2$，因而可求出能量本征值

$$E = -\frac{\hbar^2\beta^2}{2m} = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2} \tag{6}$$

由归一化条件可求出 $|C| = \sqrt{\beta} = 1/\sqrt{L}$，$L = \hbar^2/m\gamma$ 为 δ 势的特征长度. 这样，偶宇称能量本征态可表示成

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{-|x|/L}. \tag{7}$$

其次讨论奇宇称态. 波函数形式如下

---

[2] 曾谨言. 量子力学 卷 I. 北京：科学出版社，1990.108.

$$\psi(x)=\begin{cases}Ae^{-\beta x}, & x>0,\\ -Ae^{\beta x}, & x<0.\end{cases}\tag{8}$$

代入 $\psi'(x)$跃变条件(4),得 $A=0$,即 $\psi(x)\equiv0$.所以 δ 势阱不存在奇宇称束缚态.从物理上来看,这是很合理的,因为 δ 势阱在 $x=0$处无作用,而对于奇宇称态,$\psi(-x)=-\psi(x)$,必有 $\psi(0)=0$,即粒子在 $x=0$ 点的概率为 0,因而不受 δ 势阱的影响,所以不能构成束缚态.

由以上分析还可判定,**δ势阱中只存在唯一的束缚定态,其宇称为偶**.

散射态($E>0$)

设粒子从左入射,波函数可表示为

$$\psi(x)=\begin{cases}e^{ikx}+Re^{-ikx}, & x<0\\ Se^{ikx}, & x>0\end{cases}\tag{9}$$

$$k=\sqrt{2mE}/\hbar.$$

入射、反射和透射流密度分别为 $v=\hbar k/m$,$|R|^2v$ 和 $|S|^2v$.根据 $x=0$处 $\psi(x)$连续和 $\psi'(x)$跃变条件(4),可得出

$$1+R=S,$$

$$1-R=S+\frac{2m\gamma}{ik\hbar^2}.$$

两式相加,得透射振幅

$$S=(1+m\gamma/ik\hbar^2)^{-1},\tag{10}$$

因而

$$R=S-1=-\frac{m\gamma}{ik\hbar^2}\Big/\left(1+\frac{m\gamma}{ik\hbar^2}\right).\tag{11}$$

由此可求出透射系数

$$|S|^2=\left(1+\frac{m^2\gamma^2}{\hbar^{-1}k^2}\right)^{-1}=\left(1+\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2E}\right)^{-1},\tag{12}$$

和反射系数

$$|R|^2=\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2E}\Big/\left(1+\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2E}\right)=1-|S|^2.\tag{13}$$

由(10)式可以看出，如解析延拓到 $E<0$，即复 k 平面，则会发现透射振幅 S 的极点位于

$$k = \mathrm{i}m\gamma/\hbar^2, \tag{14}$$

相应的能量值为

$$E = \hbar^2k^2/2m = -m\gamma^2/2\hbar^2, \tag{15}$$

它正是束缚定态的能量(6). 换言之，束缚能级所在，相应于透射振幅极点位置(正虚 k 轴上).

若为δ势垒((1)式中 $\gamma<0$)，S 极点处于负虚 k 轴上，它们并不相应于束缚能级(δ势垒不存在束缚能级).

应该提到，透射系数 $|S|^2$ 与 γ 正负号(垫垒或势阱)无关，并且随入射能量 E 单调上升，不出现共振透射现象，这与方势阱不同(见§9.2).

还应注意，$\psi'(x)$ 的不连续性并不一定导致流密度的不连续性. 按式(9)及(4)

$$\psi(0^-) = 1 + R = S = \psi(0^+)$$

$$\psi'(0^-) = \mathrm{i}k(1-R) = \mathrm{i}kS - \frac{2m\gamma}{\hbar^2}S,$$

$$\psi'(0^+) = \mathrm{i}kS \neq \psi'(0^-).$$

但流密度 $j_x = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}[\psi^*(x)\psi'(x) - \psi(x)\psi^{*\prime}(x)]$,

$$j_x(0^+) = \frac{\hbar k}{m}|S|^2,$$

$$j_x(0^-) = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left[S^*\left(\mathrm{i}kS - \frac{2m\gamma}{\hbar^2}S\right) - \text{复共轭项}\right]$$

$$= \frac{\hbar k}{m}|S|^2 = j_x(0^+).$$

可以看出，在 $x=0$ 点，$\psi'(x)$ 不连续，但 j_x 是连续的.

9.2 方 势 阱

考虑对称方势阱

$$V(x)=\begin{cases}-V_0, & |x|<a/2,\\ 0, & |x|>a/2.\end{cases} \tag{1}$$

设粒子($E>0$)从左入射,波函数表示为

$$\psi(x)=\begin{cases}e^{ikx}+Re^{-ikx}, & x<-a/2\\ Ae^{ik'x}+Be^{-ik'x}, & |x|<a/2\\ Se^{ikx}, & x>a/2\end{cases} \tag{2}$$

$$k=\sqrt{2mE}/\hbar\,,k'=\sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar. \tag{3}$$

利用 $x=\pm a/2$ 处 $\psi(x)$ 及 $\psi'(x)$ 的连续性,可定出系数 A,B,R 和 S,其中透射振幅 S 由下式给出

$$Se^{ika}=\left[\cos k'a-\frac{i}{2}\left(\frac{k'}{k}+\frac{k}{k'}\right)\sin k'a\right]^{-1}. \tag{4}$$

透射振幅的极点与束缚能级

作解析延拓到 $E<0$(复 k 平面,但 $E>-V_0,k'$ 仍为实),可看出 S 的极点由下式确定

$$\cos k'a-\frac{i}{2}\left(\frac{k'}{k}+\frac{k}{k'}\right)\sin k'a=0.$$

由此给出

$$\tan k'a=2\Big/i\left(\frac{k'}{k}+\frac{k}{k'}\right). \tag{5}$$

利用 $\tan 2x=2/(\cot x-\tan x)$,可得

$$\cot\frac{k'a}{2}-\tan\frac{k'a}{2}=i\left(\frac{k'}{k}+\frac{k}{k'}\right). \tag{7}$$

此式有两组解

$$\tan\frac{k'a}{2}=-i\frac{k}{k'},\left(\cot\frac{k'a}{2}=ik'/k\right), \tag{8}$$

$$\cot\frac{k'a}{2}=i\frac{k}{k'},\left(\tan\frac{k'a}{2}=-i\frac{k'}{k}\right).$$

令 $k=i\beta,\beta=\sqrt{-2mE}/\hbar$ 为实,则上式化为

$$k' \tan \frac{k'a}{2} = \beta,$$
$$k' \cot \frac{k'a}{2} = -\beta. \tag{9}$$

这正是确定方势阱(1)中粒子束缚能级的方程.

共振能级

按(4)式,粒子透射几率为

$$T = |S|^2 = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k'}{k} - \frac{k}{k'}\right)^2 \sin^2 k'a\right]^{-1}$$
$$= \left[1 + \sin^2 k'a \Big/ 4\frac{E}{V_0}\left(1 + \frac{E}{V_0}\right)\right]^{-1}. \tag{10}$$

作为能量的函数,$T(E)$有振荡性质,见图9.1.可以看出,当$\sin k'a = 0$时,粒子完全透过方势阱,$T(E) = 1$,称为共振透射,条件是$k'a = n\pi, n = 1,2,3,\cdots$.如用粒子在方势阱中的波长$\lambda' = 2\pi/k'$来表示,则为

$$n \cdot (\lambda'/2) = a(\text{共振条件}). \tag{11}$$

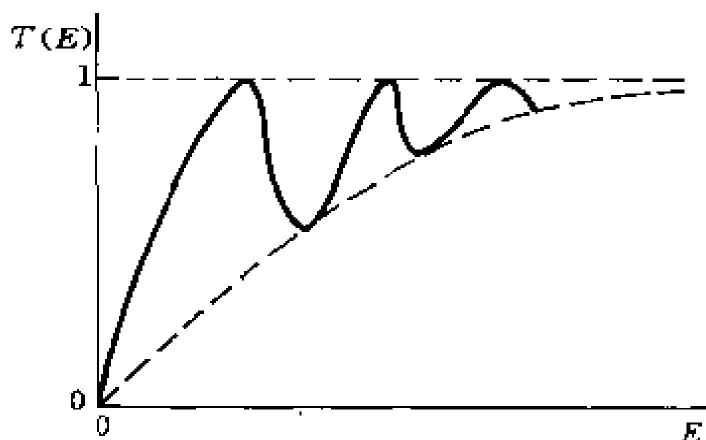


图 9.1 方势阱的透射概率 $T(E)$随粒子能量 E 的变化示意图. $T(E) = 1$ 相应的能量为共振能量.

此时,粒子经历多次碰撞阱壁而反射,最后透射出方势阱的波的相位相同,因而透射波幅将极大加强,形成共振透射.此时,粒子能量为(以阱底为参照)

$$E + V_0 = n^2\pi^2\hbar^2/(2ma^2). \tag{12}$$

这与无限深方势阱中粒子能量(以阱底为参照)完全相同.与无限深方势阱中存在无穷多条束缚能级不同,在有限深方势阱中只存在有限多条束缚能级.事实上,当量子数 n 足够大,使 $E>0$,即 $n^2 > 2mV_0a^2/\pi^2\hbar^2$ 时,相应的 n(正整数)态即构成共振态(而不再是束缚态).

对于方势阱(1),当 $V_0\to\infty$, $a\to 0$,但保持 $V_0a=\gamma$,则趋于 δ 势阱 $-\gamma\delta(x)$.此时透射系数(10)式中($k'\simeq\sqrt{2mV_0/\hbar^2}$)

$$\frac{\sin^2 k'a}{4\dfrac{E}{V_0}\left(1+\dfrac{E}{V_0}\right)} \simeq \frac{V_0}{4E}\cdot\sin^2\left[\sqrt{2mV_0a^2/\hbar^2}\right]$$

$$= \frac{\gamma}{4Ea}\cdot\sin^2\left[\sqrt{\frac{2m\gamma^2}{V_0\hbar^2}}\right] \simeq \frac{\gamma}{4Ea}\,\frac{2m\gamma^2}{V_0\hbar^2}$$

$$= \frac{m\gamma^2}{2E\hbar^2}$$

因而

$$T \simeq \left[1+\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2E}\right]^{-1} \tag{13}$$

与 δ 势阱的透射系数(见 §9.1(12)式)完全相同.此极限下,共振条件(见(11)式)不再满足,所以 δ 势阱不出现共振透射.

9.3 δ 势阱+半壁无限高势垒

$$V(x) = \begin{cases} -\gamma\delta(x+a), & x<0 \\ \infty, & x>0. \end{cases} \tag{1}$$

束缚态($E<0$)

令 $\beta=\sqrt{-2mE}/\hbar$,束缚态波函数可表示为

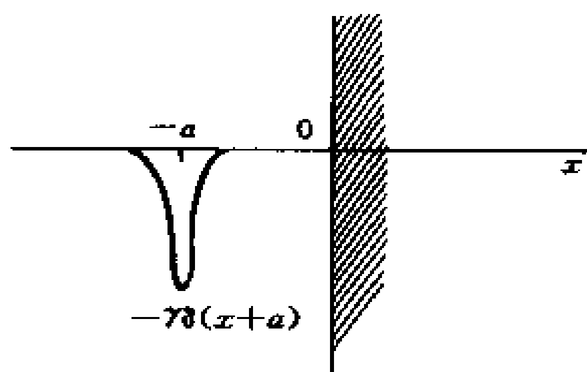


图 9.2

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{\beta x}, & x < -a \\ A(e^{\beta x} - e^{-\beta x}), & -a < x < 0 \\ 0, & x > 0. \end{cases} \tag{2}$$

按 $x = -a$ 处 $\psi(x)$ 连续及 $\psi'(x)$ 跃变条件,可得

$$e^{-\beta a} = A(e^{-\beta a} - e^{\beta a}),$$

$$\beta e^{-\beta a} - A\beta(e^{-\beta a} + e^{\beta a}) = \frac{2m\gamma}{\hbar^2} e^{-\beta a}.$$

消去 A,得

$$\left(1 - \frac{2m\gamma}{\hbar^2\beta}\right)(e^{-2\beta a} - 1) = (e^{-2\beta a} + 1). \tag{3}$$

上式还可改写为

$$\left(1 - \frac{2}{\beta L}\right) = -\frac{e^{\beta a} + e^{-\beta a}}{e^{\beta a} - e^{-\beta a}} \equiv -\coth\beta a, \tag{3'}$$

式中 $L = \hbar^2/m\gamma$ 为 δ 势阱的特征长度.(3′)式即确定束缚能级的方程.

束缚定态存在的条件($E \sim 0^-$):当 $E \to 0^-$ 时,$\beta a \to 0^+$.利用 $\lim\limits_{\beta a \to 0^+} \beta a \coth\beta a = 1$,(3′)式化为 $1 + 0^+ = 2a/L$,即 $2a/L > 1$.所以存在束缚态的条件为

$$a > L/2. \tag{4}$$

当 $a \to \infty$ 时,$\beta a \to \infty$,$\coth\beta a \to 1$,(3′)式化为 $\beta = 1/L = m\gamma/\hbar^2$,

因而

$$E = -\frac{\hbar^2\beta^2}{2m} = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2}, \tag{5}$$

即 δ 势阱中唯一的一条束缚能级. 此结果是意料中的事,因为 $a\to\infty$ 时,半壁无限高势垒对 δ 势阱能级的影响完全消失.

散射态 $(E>0)$

令 $k=\sqrt{2mE}/\hbar$,从左入射粒子的波函数可表示成

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & x < -a \\ A(e^{ikx} - e^{-ikx}), & -a < x < 0 \\ 0, & x > 0. \end{cases} \tag{6}$$

$x=-a$ 处 $\psi(x)$ 连续及 $\psi'(x)$ 跃变条件为

$$\begin{aligned} &e^{-ika} + Re^{ika} = A(e^{-ika} - e^{ika}), \\ &ik(e^{-ika} - Re^{ika}) - ikA(e^{-ika} + e^{ika}) \\ &= \frac{2m\gamma}{\hbar^2}(e^{-ika} + Re^{ika}). \end{aligned} \tag{7}$$

消去 A,得

$$\frac{e^{-ika} + Re^{ika}}{\left(ik - \frac{2m\gamma}{\hbar^2}\right)e^{-ika} - \left(ik + \frac{2m\gamma}{\hbar^2}\right)Re^{ika}} = \frac{e^{-ika} - e^{ika}}{ik(e^{-ika} + e^{ika})}. \tag{8}$$

解出 R,得

$$\begin{aligned} R &= \frac{\left(ik - \frac{2m\gamma}{\hbar^2}\right)(e^{-2ika} - 1) - ik(e^{-2ika} - 1)}{ik(1 + e^{2ika}) + \left(ik + \frac{2m\gamma}{\hbar^2}\right)(1 - e^{2ika})} \\ &= -\frac{(2m\gamma/\hbar^2)(1 - e^{-2ika})}{ik\left[(1 + e^{2ika}) + \left(1 + \frac{2m\gamma}{\hbar^2 ik}\right)(1 - e^{2ika})\right]}. \end{aligned} \tag{9}$$

解析延拓到 $E<0$(复 k 平面),令 $k=i\beta$, $\beta=\sqrt{-2mE}/\hbar$,则 R 极点位置由下式确定

$$(1 + e^{-2\beta a}) + \left(1 - \frac{2m\gamma}{\hbar^2\beta}\right)(1 - e^{-2\beta a}) = 0. \tag{10}$$

与(3)式相同.

共振态($E>0$)

散射态(6)式中,考虑到概率守恒,要求$|R|=1$.令$R=e^{-2i\delta}$,(δ实),则(6)式可改写成(去掉无关紧要的常数因子)

$$\psi(x)=\begin{cases}\sin(kx+\delta), & x<-a\\ A\sin kx, & -a<x<0\\ 0, & x>0.\end{cases} \tag{11}$$

由$x=-a$处$\psi(x)$连续及$\psi'(x)$跃变条件,得

$$\begin{aligned}&\sin(ka-\delta)=A\sin ka,\\ &\cos(ka-\delta)-A\cos ka=-\frac{2}{kL}A\sin ka,\end{aligned} \tag{12}$$

式中$L=\hbar^2/m\gamma$.消去δ,得

$$A^2=\left[1-\frac{2}{kL}\sin 2ka+\frac{4}{k^2L^2}\sin^2 ka\right]^{-1}. \tag{13}$$

从(12)式消去A,则得

$$\tan(ka-\delta)=\frac{\tan ka}{1-\frac{2}{kL}\tan ka},$$

即
$$\delta=ka-\arctan\left[\frac{\tan ka}{1-\frac{2}{kL}\tan ka}\right]. \tag{14}$$

当$1/kL\gg 1$时,一般$A^2\ll 1$.但在粒子能量合适的情况下,$\sin ka=0$,即

$$ka=n\pi,n=1,2,\cdots, \tag{15}$$

则$A^2=1$.此时粒子有很大概率停留在[$-a<x<0$]区间,即出现共振现象.

9.4 半壁无限高方势阱

$$V(x)=\begin{cases}0, & x<-a\\ -V_0, & -a<x<0\\ \infty, & x>0\end{cases} \tag{1}$$

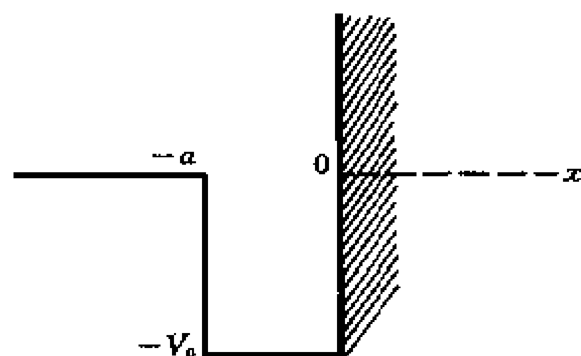


图 9.3

束缚态($-V_0<E<0$)

令 $\beta=\sqrt{-2mE}/\hbar$，$k=\sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$，则束缚态波函数表示为

$$\psi(x)=\begin{cases}e^{\beta x}, & x<-a\\ A\sin kx, & -a<x<0\\ 0, & x>0.\end{cases} \tag{2}$$

由 $x=-a$ 处 $\psi(x)$ 及 $\psi'(x)$ 连续条件，得

$$\begin{aligned}e^{-\beta a}&=-A\sin ka,\\ \beta e^{-\beta a}&=kA\cos ka.\end{aligned} \tag{3}$$

消去 A，得

$$\frac{1}{k}\tan ka=-\frac{1}{\beta}, \tag{4}$$

是确定 k(即束缚能级 $E=-V_0+\hbar^2k^2/2m$)的方程. 有解条件(即存在束缚能级的条件)为[3]

$$V_0a^2\geqslant\pi^2\hbar^2/8m. \tag{5}$$

散射态($E>0$)

令 $k'=\sqrt{2mE}/\hbar$，$k=\sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$，则散射态(从左入射)波函数可表示为

---

〔3〕 参阅：曾谨言. 量子力学　卷Ⅰ. 北京：科学出版社，1990.92.

$$\psi(x)=\begin{cases}e^{ik'x}+Re^{-ik'x}, & x<-a\\ A\sin kx, & -a<x<0\\ 0, & x>0\end{cases}\tag{6}$$

由 $x=-a$ 处 $\psi(x)$ 及 $\psi'(x)$ 连续条件，得

$$\begin{aligned}&e^{-ik'a}+Re^{ik'a}=-A\sin ka,\\&ik'(e^{-ik'a}-Re^{ik'a})=Ak\cos ka.\end{aligned}\tag{7}$$

消去 A，得

$$\frac{e^{-ik'a}+Re^{ik'a}}{e^{-ik'a}-Re^{ik'a}}=-\frac{ik'}{k}\tan ka.\tag{8}$$

由此可解出 R

$$R=\left(\frac{-\dfrac{ik'}{k}\tan ka-1}{-\dfrac{ik'}{k}\tan ka+1}\right)e^{-2ik'a}.\tag{9}$$

解析延拓到 $E<0$(复 k' 平面)，令 $k'=i\beta,\beta=\sqrt{-2mE}/\hbar$，则 R 极点由下式给出

$$\frac{\beta}{k}\tan ka+1=0,\tag{10}$$

与(4)式相同.

共振态($E>0$)

(6)式中令 $R=e^{-2i\delta}$(δ 实)，则 $\psi(x)$ 可改写成(去掉一个无关紧要的常数因子)

$$\psi(x)=\begin{cases}\sin(k'x+\delta), & x<-a\\ A\sin kx, & -a<x<0\\ 0, & x>0\end{cases}\tag{11}$$

利用 $x=-a$ 处 $\psi(x)$ 及 $\psi'(x)$ 连续条件，得

$$\begin{aligned}&\sin(k'a-\delta)=A\sin ka,\\&\cos(k'a-\delta)=\frac{k}{k'}A\cos ka.\end{aligned}\tag{12}$$

消去 δ，得

$$A^2 = \left[\sin^2 ka + \frac{k^2}{k'^2}\cos^2 ka\right]^{-1}. \tag{13}$$

出现共振($A^2 = 1$)的条件为

$$\sin^2 ka + \frac{k^2}{k'^2}\cos^2 ka = 1,$$

即

$$\sin^2 ka\left(1 - \frac{k^2}{k'^2}\right) = \left(1 - \frac{k^2}{k'^2}\right). \tag{14}$$

当 $V_0 \neq 0(k' \neq k)$时,上式给出 $\sin^2 ka = 1$,即

$$ka = (n + \frac{1}{2})\pi, n = 0,1,2,\cdots. \tag{15}$$

相应能量为

$$E_n = -V_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}(n + \frac{1}{2})^2, n = 0,1,2,\cdots. \tag{16}$$

对于 $n = 0$,有

$$E_0 = -V_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}. \tag{17}$$

若 $V_0 > \pi^2\hbar^2/8ma^2$,则 $E_0 < 0$,即可出现束缚能级(参见(5)式).

9.5 双 δ 势 阱

$$V(x) = -\gamma[\delta(x + a) + \delta(x - a)], \gamma > 0. \tag{1}$$

束缚态($E < 0$)

由于 $V(x)$具有反射对称性,而束缚定态又不简并,所以它们必具有确定宇称。令 $\beta = \sqrt{-2mE}/\hbar$,则偶宇称态可表示成

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\beta x}, & x < -a \\ e^{\beta x} + e^{-\beta x}, & |x| < a \\ Ae^{-\beta x}, & x > a. \end{cases} \tag{2}$$

根据 $x = -a$ 处 $\psi(x)$连续及 $\psi'(x)$跃变条件,有

$$
\begin{aligned}
&Ae^{-\beta a} = e^{-\beta a} + e^{\beta a}, \\
&\beta Ae^{-\beta a} - \beta(e^{-\beta a} - e^{\beta a}) = \frac{2m\gamma}{\hbar^2}Ae^{-\beta a}.
\end{aligned}
\tag{3}
$$

消去 A,得

$$
\frac{2}{\beta L} - 1 = \frac{e^{\beta a} - e^{-\beta a}}{e^{\beta a} + e^{-\beta a}} = \frac{1 - e^{-2\beta a}}{1 + e^{-2\beta a}} = \tanh \beta a, \tag{4}
$$

式中 $L = \hbar^2/m\gamma$. 上式还可改写成

$$
2\frac{a}{L} = \beta a(\tanh\beta a + 1). \tag{4'}
$$

可解出 $\beta L = 1 + e^{-2\beta a}$. 能量本征值 $E = -\hbar^2\beta^2/2m = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}(\beta a)^2$, βa 由 a/L 决定.

对于奇宇称态,类似有

$$
2\frac{a}{L} = \beta a(\coth\beta a + 1). \tag{5}
$$

同样,解出 $\beta L = 1 - e^{-2\beta a}$. 概括起来,确定束缚能级的方程为

$$
e^{-2\beta a} = \pm(1 - \beta L), \text{或 } e^{-4\beta a} = (1 - \beta L)^2. \tag{6}
$$

方程的有解条件的详细讨论,参见[4].

散射态($E > 0$)

令 $k = \sqrt{2mE}/\hbar$,则散射态(从左入射)波函数可表示成

$$
\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & x < -a \\ Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & |x| < a \\ Se^{ikx}, & x > a. \end{cases} \tag{7}
$$

根据 $x = \pm a$ 处 $\psi(x)$ 连续及 $\psi'(x)$ 跃变条件,可解出系数 R, A, B 和 S,其中

$$
S = \frac{k^2L^2}{[(1 + ikL)^2 - e^{i4ka}]}, \tag{8}
$$

---

[4] 钱伯初,曾谨言. 量子力学习题精选与剖析. 北京:科学出版社,1988. 36～38.

式中 $L=\hbar^2/m\gamma$.解析延拓到 $E<0$(复 k 平面),可发现 S 极点位置.令 $k=\mathrm{i}\beta_1$,$\beta=\sqrt{-2mE}/\hbar$,则极点位置由下式给出

$$(1-\beta L)^2=\mathrm{e}^{-4\beta a},\tag{9}$$

与(6)式相同.

9.6 不对称方势阱

$$V(x)=\begin{cases}V_1, & x<0\\ 0, & 0<x<a\\ V_2, & x>a,(V_2>V_1)\end{cases}\tag{1}$$

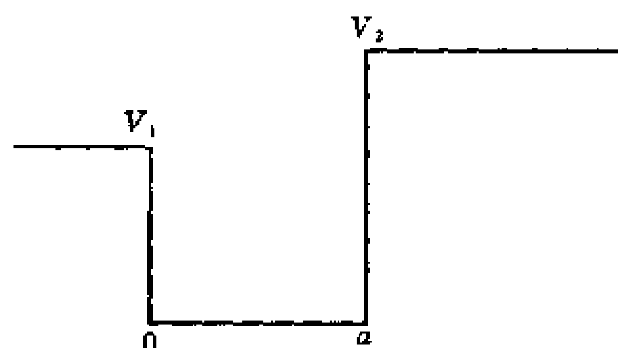


图 9.4

束缚态($0<E<V_1<V_2$)

令 $\beta_1=\sqrt{2m(V_1-E)}/\hbar$,$\beta_2=\sqrt{2m(V_2-E)}/\hbar$,$k=\sqrt{2mE}/\hbar$,则束缚态波函数可以表示成

$$\psi(x)=\begin{cases}A\mathrm{e}^{\beta_1 x}, & x<0\\ C\sin kx+D\cos kx, & 0<x<a\\ B\mathrm{e}^{-\beta_2 x}, & x>a.\end{cases}\tag{2}$$

由 $x=0$ 和 a 处 $\psi(x)$及 $\psi'(x)$连续条件,得

$$A=D,\tag{3}$$

$$\beta_1 A=kC,\tag{4}$$

$$B\mathrm{e}^{-\beta_2 a}=C\sin ka+D\cos ka,\tag{5}$$

$$-\beta_2 B e^{-\beta_2 a} = k(C\cos ka - D\sin ka). \tag{6}$$

(3),(4)式代入(5),(6)式消去 C 和 D.再由(5)/(6),得

$$-\frac{1}{\beta_2} = \frac{\dfrac{\beta_1}{k}\sin ka + \cos ka}{\beta_1\cos ka - k\sin ka},$$

改写成

$$\tan ka = \frac{\beta_1/k + \beta_2/k}{1 - \beta_1\beta_2/k^2}. \tag{7}$$

此即确定束缚能级的方程.

散射态,分两种情况:

(1) $E > V_2 > V_1 > 0$,令 $k_1 = \sqrt{2m(E-V_1)}/\hbar$, $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $k_2 = \sqrt{2m(E-V_2)}/\hbar$,则波函数表示为

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_1x} + Re^{-ik_1x}, & x < 0 \\ A\cos kx + B\sin kx, & 0 < x < a \\ Se^{ik_2x}, & x > a. \end{cases} \tag{8}$$

在 $x=0$ 和 a 处 $\psi(x)$ 及 $\psi'(x)$ 连续的条件可得出

$$1 + R = A,$$

$$ik_1(1-R) = kB,$$

$$Se^{ik_2a} = A\cos ka + B\sin ka,$$

$$ik_2Se^{ik_2a} = -kA\sin ka + kB\cos ka.$$

消去 A,B,S,可得

$$\frac{ik_2}{k} = \frac{-(1+R)\tan ka + \dfrac{ik_1}{k}(1-R)}{(1+R) + \dfrac{ik_1}{k}(1-R)\tan ka}.$$

解出 R,

$$R = \frac{\tan ka(k_1k_2 - k^2) + ik(k_1 - k_2)}{\tan ka(k_1k_2 + k^2) + ik(k_1 + k_2)}. \tag{9}$$

解析延拓到 $E < V_1 < V_2$(复 k_1, k_2 平面),令 $k_1 = i\beta_1$, $k_2 = i\beta_2$,则 R

的极点位置由下式确定,

$$\tan ka(-\beta_1\beta_2+k^2)-k(\beta_1+\beta_2)=0,$$

即

$$\tan ka=\frac{\beta_1/k+\beta_2/k}{1-\beta_1\beta_2/k^2}, \tag{10}$$

与(7)式相同.

(2) $V_1<E<V_2$

波函数表示为

$$\psi(x)=\begin{cases}e^{ik_1x}+Re^{-ik_1x}, & x<0\\ A\cos kx+B\sin kx, & 0<x<a\\ Se^{-\beta_2x}, & x>a.\end{cases} \tag{11}$$

边条件为

$$\begin{aligned}&1+R=A,\\ &ik_1(1-R)=kB,\\ &Se^{-\beta_2a}=A\cos ka+B\sin ka,\\ &-\beta_2Se^{-\beta_2a}=-kA\sin ka+kB\cos ka.\end{aligned}$$

消去 A,B,S,得

$$R=\frac{k(ik_1+\beta_2)+(ik_1\beta_2-k^2)\tan ka}{k(ik_1-\beta_2)+(ik_1\beta_2+k^2)\tan ka}. \tag{12}$$

解析延拓到 $E<V_1<V_2$(复 k_1 平面),令 $k_1=i\beta_1$,则 R 极点位置由下式确定,

$$\tan ka=\frac{\beta_1/k+\beta_2/k}{1-\beta_1\beta_2/k^2}, \tag{13}$$

也与(7)式相同.

$E>V_2>V_1>0$ 情况的另一种解法.波函数形式取为

$$\psi(x)=\begin{cases}e^{ik_1x}+Re^{-ik_1x}, & x<0\\ Ae^{ikx}+Be^{-ikx}, & 0<x<a\\ Se^{ik_2x}. & x>a\end{cases} \tag{14}$$

边条件为

$$
\begin{aligned}
&1+R=A+B,\\
&\frac{k_1}{k}(1-R)=A-B,\\
&Ae^{ika}+Be^{-ika}=Se^{ik_2a},\\
&Ae^{ika}-Be^{-ika}=\frac{k_2}{k}Se^{ik_2a}.
\end{aligned}
\tag{15}
$$

由(15)式前两式可解出

$$
\begin{aligned}
A&=\frac{1}{2}(1+k_1/k)+\frac{R}{2}(1-k_1/k),\\
B&=\frac{1}{2}(1-k_1/k)+\frac{R}{2}(1+k_1/k).
\end{aligned}
\tag{16}
$$

由(15)式后两式可解出

$$
\begin{aligned}
A&=\frac{1}{2}e^{-ika}(1+k_2/k)e^{ik_2a}S,\\
B&=\frac{1}{2}e^{ika}(1-k_2/k)e^{ik_2a}S.
\end{aligned}
\tag{17}
$$

比较(16)与(17)式,得

$$
\begin{aligned}
(1+k_1/k)+(1-k_1/k)R&=e^{-ika}(1+k_2/k)e^{ik_2a}S,\\
(1-k_1/k)+(1+k_1/k)R&=e^{ika}(1-k_2/k)e^{ik_2a}S.
\end{aligned}
$$

消去 R,得

$$
\begin{aligned}
S[(1+k_2/k)(1+k_1/k)e^{-ika}-(1-k_2/k)(1-k_1/k)e^{ika}]e^{ik_2a}\\
=(1+k_1/k)^2-(1-k_1/k)^2.
\end{aligned}
\tag{18}
$$

S 的极点位置由下式给出

$$
(1+k_2/k)(1+k_1/k)e^{-ika}=(1-k_2/k)(1-k_1/k)e^{ika},
$$

即

$$
e^{i2ka}=\frac{k^2+k(k_1+k_2)+k_1k_2}{k^2-k(k_1+k_2)+k_1k_2}.
\tag{19}
$$

令 $k_1=i\beta_1,k_2=i\beta_2$,上式化为

$$e^{i2ka} = \frac{(k^2 - \beta_1\beta_2) + ik(\beta_1 + \beta_2)}{(k^2 - \beta_1\beta_2) - ik(\beta_1 + \beta_2)} = e^{ika}/e^{-ika}.$$

所以

$$e^{ika} = (k^2 - \beta_1\beta_2) + ik(\beta_1 + \beta_2), \tag{20}$$

因而

$$\begin{aligned}\sin ka &= \frac{k(\beta_1 + \beta_2)}{[(k^2 - \beta_1\beta_2)^2 + k^2(\beta_1 + \beta_2)^2]^{1/2}} \\ &= \frac{k(\beta_1 + \beta_2)}{[(k^2 + \beta_1^2)(k^2 + \beta_2^2)]^{1/2}} \\ &= \frac{k(\beta_1 + \beta_2)}{\sqrt{\frac{2mV_1}{\hbar^2}\frac{2mV_2}{\hbar^2}}}.\end{aligned} \tag{21}$$

由此可得出[5]

$$ka = n\pi - \arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}} - \arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_2}}. \tag{22}$$

9.7 势阱 $V(x) = -V_0\mathrm{sech}^2\eta x$

考虑粒子对势阱

$$V(x) = -V_0\mathrm{sech}^2\eta x \tag{1}$$

的散射. 设粒子从左入射,能量 $E > 0$. Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) - V_0\mathrm{sech}^2\eta x\psi(x) = E\psi(x). \tag{2}$$

令 $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$,则上式可化为

$$\psi''(x) + [k_0^2\mathrm{sech}^2\eta x + k^2]\psi(x) = 0. \tag{3}$$

作函数替换,令

---

[5] Landau, Lifshitz. *Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory*. 3rd. ed. New York: Pergamon Press, 1977. 66.

$$\psi(x) = (\mathrm{sech}\,\eta x)^{2\lambda}\varphi(x), \tag{4}$$

$$\lambda = \frac{1}{4}\left[\sqrt{4k_0^2/\eta^2 + 1} - 1\right], (\text{无量纲})$$

代入(3)式,经过仔细计算,可以得出

$$\varphi''(x) - 4\eta\lambda\tanh\eta x\varphi'(x) + 4\eta^2\left(\lambda^2 + \frac{k^2}{4\eta^2}\right)\varphi(x) = 0. \tag{5}$$

作变量替换,引进无量纲变量

$$z = -\mathrm{sh}^2\eta x, \tag{6}$$

经过仔细计算,方程(5)可化为超几何方程

$$z(1-z)\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}z^2} + \left[\frac{1}{2} - (1-2\lambda)z\right]\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z} - \left(\lambda^2 + \frac{k^2}{4\eta^2}\right)\varphi = 0. \tag{7}$$

与超几何方程的标准形式

$$z(1-z)\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}z^2} + [\gamma - (\alpha+\beta+1)z]\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z} - \alpha\beta\varphi = 0 \tag{8}$$

比较,相当于

$$\gamma = 1/2, \alpha + \beta + 1 = 1 - 2\lambda, \alpha\beta = \lambda^2 + k^2/4\eta^2,$$

即

$$\gamma = 1/2, \alpha = -\lambda + \mathrm{i}k/2\eta, \beta = \alpha^* = -\lambda - \mathrm{i}k/2\eta. \tag{9}$$

因此方程(7)的两个线性独立解可以表示为

$$\varphi_1(z) = F(-\lambda + \mathrm{i}k/2\eta, -\lambda - \mathrm{i}k/2\eta, 1/2, z),$$

$$\varphi_2(z) = \sqrt{|z|}F(-\lambda + \mathrm{i}k/2\eta + 1/2, -\lambda - \mathrm{i}k/2\eta - 1/2, 3/2, z). \tag{10}$$

$F(\alpha,\beta,\gamma,z)$为超几何函数

方程(5)的一般解可表示为

$$\psi = C_1(\mathrm{ch}\,\eta x)^{-2\lambda}\varphi_1 + C_2(\mathrm{ch}\,\eta x)^{-2\lambda}\varphi_2 \tag{11}$$

C_1 与 C_2 由边条件确定. 为此,先讨论超几何函数的渐近行为.

$$\text{当 } x \to -\infty, \mathrm{sh}\,\eta x = \frac{1}{2}(\mathrm{e}^{\eta x} - \mathrm{e}^{-\eta x}) \to -\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\eta x} \to -\infty$$

$$\operatorname{ch}\eta x=\frac{1}{2}(e^{\eta x}+e^{-\eta x})\to\frac{1}{2}e^{-\eta x}\to+\infty$$

$$z=-\operatorname{sh}^2\eta x\to-\infty$$

考虑到

$$F(\alpha,\beta,\gamma,z)=1+\frac{\alpha\beta}{\gamma}\frac{z}{1!}+\frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!}+\cdots$$

不便于讨论 $z\to-\infty$ 的行为，但利用下列关系[5]

$$\begin{aligned}&F(\alpha,\beta,\gamma,z)\\&=\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\beta-\alpha)}{\Gamma(\beta)\Gamma(\gamma-\alpha)}(-z)^{-\alpha}F(\alpha,\alpha+1-\gamma,\alpha+1-\beta,1/z)\\&+\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha-\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)}(-z)^{-\beta}F(\beta,\beta+1-\gamma,\beta+1-\alpha,1/z)\end{aligned}$$

就很方便。当 $x\to-\infty$，$1/z\to0$，$F(\alpha,\beta,\gamma,1/z)\to1$. 利用

$$(-z)^{-\alpha}=(\operatorname{sh}^2\eta x)^{\lambda-ik/2\eta}\to\left(-\frac{1}{2}e^{-\eta x}\right)^{2\lambda-ik/\eta}$$

$$=\left(-\frac{1}{2}\right)^{2\lambda-ik/\eta}e^{-2\lambda\eta x+ikx},$$

$$(\operatorname{ch}\eta x)^{-2\lambda}\to\left(\frac{1}{2}e^{-\eta x}\right)^{2\lambda}=2^{2\lambda}e^{2\lambda\eta x},$$

令

$$\begin{aligned}A_1&=\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma(-ik/\eta)}{\Gamma\left(-\lambda-\frac{ik}{2\eta}\right)\Gamma\left(\lambda+\frac{1}{2}-\frac{ik}{2\eta}\right)},\\B_1&=\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma(ik/\eta)}{\Gamma\left(-\lambda+\frac{ik}{2\eta}\right)\Gamma\left(\lambda+\frac{1}{2}+\frac{ik}{2\eta}\right)},\end{aligned}\tag{12}$$

则（注意，$\beta=\alpha^*$）当 $x\to-\infty$ 时，

$$(\operatorname{ch}\eta x)^{-2\lambda}F\left(-\lambda+\frac{ik}{2\eta},-\lambda-\frac{ik}{2\eta},\frac{1}{2},-\operatorname{sh}^2\eta x\right)$$

$$\to(-1)^{2\lambda}\left[A_1\left(-\frac{1}{2}\right)^{-ik/\eta}e^{ikx}+B_1\left(-\frac{1}{2}\right)^{ik/\eta}e^{-ikx}\right].$$

类似有，$x\to-\infty$时

$$(\mathrm{ch}\,\eta x)^{-2\lambda}|\mathrm{sh}\,\eta x|F\left(-\lambda+\frac{\mathrm{i}k}{2\eta}+\frac{1}{2},-\lambda-\frac{\mathrm{i}k}{2\eta}-\frac{1}{2},\frac{3}{2},-\mathrm{sh}^2\eta x\right)$$

$$\to(-1)^{2\lambda}\left[-A_2\left(-\frac{1}{2}\right)^{-k/\eta}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}-B_2\left(-\frac{1}{2}\right)^{-k/\eta}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\right].$$

式中

$$A_2=\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma(-\mathrm{i}k/\eta)}{\Gamma\left(-\lambda+\frac{1}{2}-\frac{\mathrm{i}k}{2\eta}\right)\Gamma\left(\lambda+1-\frac{\mathrm{i}k}{2\eta}\right)},$$

$$B_2=\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma(\mathrm{i}k/\eta)}{\Gamma\left(-\lambda+\frac{1}{2}+\frac{\mathrm{i}k}{2\eta}\right)\Gamma\left(\lambda+1+\frac{\mathrm{i}k}{2\eta}\right)}. \tag{13}$$

因此，$x\to-\infty$时，

$$\psi(x)\to(-1)^{2\lambda}\left[(C_1A_1-C_2A_2)\left(-\frac{1}{2}\right)^{-\mathrm{i}k/\eta}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\right.$$

$$\left.+(C_1B_1-C_2B_2)\left(-\frac{1}{2}\right)^{\mathrm{i}k/\eta}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\right]. \tag{14}$$

类似，$x\to+\infty$时，

$$\psi(x)\to(-1)^{2\lambda}\left[(C_1A_1+C_2A_2)\left(\frac{1}{2}\right)^{-\mathrm{i}k/\eta}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\right.$$

$$\left.+(C_1B_1+C_2B_2)\left(\frac{1}{2}\right)^{\mathrm{i}k/\eta}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\right]. \tag{15}$$

考虑到从左入射的边条件，要求$x\to+\infty$时只有右行波，所以

$$C_1A_1+C_2A_2=0. \tag{16}$$

即$C_1=-A_2C_2/A_1$. 从波函数(14)与(15)，可求出透射系数

$$D=\left|\frac{C_1B_1+C_2B_2}{C_1A_1-C_2A_2}\right|^2=\left|\frac{A_2B_1-A_1B_2}{2A_2A_1}\right|^2. \tag{17}$$

用 A_1, A_2, B_1, B_2 代入上式，并利用[6]

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \pi/\sin\pi z,$$

$$\Gamma(2z) = 2^{2z-1}\pi^{-1/2}\Gamma(z)\Gamma(z+\frac{1}{2}),$$

可求出

$$D = \frac{\mathrm{sh}^2(\pi k/\eta)}{\mathrm{sh}^2(\pi k/\eta) + \cos^2\left[\pi\left(2\lambda + \frac{1}{2}\right)\right]}$$

$$= \frac{\mathrm{sh}^2(\pi k/\eta)}{\mathrm{sh}^2(\pi k/\eta) + \cos^2\left[\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\eta^2} + 1}\right]}. \tag{18}$$

将此结果解析延拓到 $E<0$ 区域，令 $k = \mathrm{i}\kappa, \kappa^2 = -2mE/\hbar^2$. 注意，$\mathrm{shi}\pi\kappa/\eta = \mathrm{i}\sin\pi\kappa/\eta$，则发现透射振幅极点位置在

$$\sin^2(\pi\kappa/\eta) = \cos^2\left[\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\eta^2} + 1}\right] \tag{19}$$

即

$$\sin\pi\kappa/\eta = \pm\cos\left[\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\eta^2} + 1}\right] \tag{20}$$

所以

$$\pi\kappa/\eta = (n + \frac{1}{2})\pi - \frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\eta^2} + 1}, \quad n = 0,1,2,\cdots$$

即

$$\sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}\Big/\eta = \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\eta^2} + 1}$$

$$E = -\frac{\hbar^2\eta^2}{2m}\left[\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{8mV_0}{\hbar^2\eta^2}}\right]^2, \quad n = 0,1,2,\cdots. \tag{21}$$

---

[6] 参阅：Morse P M, Feshbach H. *Methods of Theoretical Physics*. New York: McGraw-Hill, 1953. 424, 式(4-5-51).

这正是势阱 $V(x)=-V_0\mathrm{sech}^2\eta x$ 中的束缚能级[7].

9.8 一维氢原子

$$V(x)=-\frac{\kappa}{|x|}. \tag{1}$$

能量本征方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)-\frac{\kappa}{|x|}\psi(x)=E\psi(x), \tag{2}$$

其束缚定态和能级的解,参见文献[2],p.307.以下讨论散射态($E>0$)解.取自然单位 $\hbar=m=\kappa=1$.令 $k=\sqrt{2E}$,方程(2)化为($x>0$ 区域)

$$\psi''+\frac{2}{x}\psi+k^2\psi=0. \tag{3}$$

与求解三维氢原子相似,令

$$\psi(x)=x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}u(x), \tag{4}$$

可得

$$xu''(x)+(2-2\mathrm{i}kx)u'(x)-2(\mathrm{i}k-1)u(x)=0. \tag{5}$$

作变量替换,令 $\xi=2\mathrm{i}kx$,则上式化为

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\xi^2}+(2-\xi)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi}-\left(1-\frac{1}{\mathrm{i}k}\right)u=0, \tag{6}$$

属于合流超几何方程,相应参数 $\gamma=2$,$\alpha=1-1/\mathrm{i}k$.由于 γ 为正整数,为便于考虑波函数在 $|\xi|\to\infty$ 的渐近行为,可把 u 表示成下列围道积分(见文献[5]App.d.8式)

$$F(\alpha,\gamma,\xi)=\frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi\mathrm{i}}\int_C\mathrm{e}^t(t-\xi)^{-\alpha}t^{\alpha-\gamma}\mathrm{d}t, \tag{7}$$

---

[7] 参阅:ter Haar D. Problems in Quantum Mechanics. New York: Academic Press, 1975.中译本:王正清等译.量子力学习题集.北京:高等教育出版社,1990.93~94.或见本书第4章,附录2.

C 分别取为绕 $t=0$ 和 $t=z$ 的周道 C_1 和 C_2(图 9.5),所得积分为方程(5)的两个线性无关解.

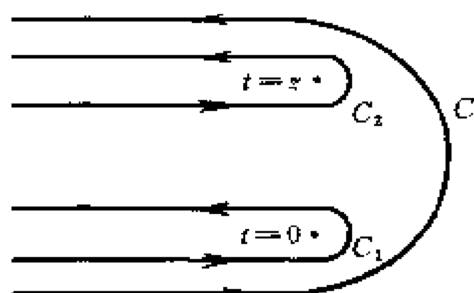


图 9.5

方程(3)的通解可表示成(文献[5]App.d.14.式)

$$\psi(x)=x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\left\{c_1\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)}\mathrm{e}^{\xi}\xi^{\alpha-\gamma}\xi^{\alpha-1}G(\gamma-\alpha,1-\alpha,\xi)\right.$$

$$\left.+c_2\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)}(-\xi)^{-\alpha}G(\alpha,\alpha-\gamma+1,-\xi)\right\},\tag{8}$$

式中 c_1 与 c_2 由边条件决定,而

$$G(\alpha,\beta,\xi)=\frac{\Gamma(1-\beta)}{2\pi\mathrm{i}}\int_{C_1}\left(1+\frac{t}{\xi}\right)^{-\alpha}t^{\beta-1}\mathrm{e}^{t}\mathrm{d}t.\tag{9}$$

当 $\xi\to\infty$ 时,

$$G(\alpha,\beta,\xi)=1+\frac{\alpha\cdot\beta}{1!\,\xi}+\frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{2!\ \xi^2}+\cdots\approx 1\tag{10}$$

用 $\xi=2\mathrm{i}kx$ 代入(8)式,($\alpha=1+\mathrm{i}/k$, $1-\alpha=-\mathrm{i}/k$, $\gamma=2$, $\gamma-\alpha=1-\mathrm{i}/k$, $\alpha-\gamma+1=\mathrm{i}/k$, $\Gamma(2)=1$, $x/\xi=\mathrm{i}/2k$),得

$$\psi(x)$$

$$=c_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\frac{1}{\Gamma(1+\mathrm{i}/k)}\cdot\frac{1}{2\mathrm{i}k}(2\mathrm{i}kx)^{\mathrm{i}/k}G(1-\mathrm{i}/k,-\mathrm{i}/k,2\mathrm{i}kx)$$

$$+c_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\frac{1}{\Gamma(1-\mathrm{i}/k)}\cdot\frac{-1}{2\mathrm{i}k}(-2\mathrm{i}kx)^{-\mathrm{i}/k}G(1+\mathrm{i}/k,\mathrm{i}/k,-2\mathrm{i}kx).\tag{11}$$

假设粒子从左入射,则在 $x>0$ 区只有右行波,应取 $c_2=0$. 因此,

在 $x>0$ 区(透射波)

$$\psi(x) \sim e^{ikx}\frac{1}{\Gamma(1+i/k)}\frac{1}{2ik}(2ikx)^{i/k}G(1-i/k,-i/k,2ikx)$$

$$\xrightarrow{x\to\infty} e^{ikx}\frac{1}{\Gamma(1+i/k)}\cdot\frac{1}{2ik}(2ikx)^{i/k}. \qquad (12)$$

解析延拓到 $E<0$(复 k 平面),令 $k=i\beta,\beta=\sqrt{-2E}$,则散射波幅极点位置由 $\Gamma(1-1/\beta)=0$ 确定. 所以 $1-1/\beta=0,-1,-2,\cdots$,即 $1/\beta=n,n=1,2,3,\cdots$,而

$$E=-\frac{1}{2}\beta^2=-1/2n^2, \quad n=1,2,3,\cdots, \qquad (13)$$

此即一维氢原子的能级公式(基态除外,一维氢原子基态能量 $E_0=-\infty$),与根据束缚态边条件直接求解能量本征方程所得结果相同[2][8]. 一维氢原子能级公式(除基态外),与三维氢原子相同. 但每条能级(除基态外)都是二重简并,一为偶宇称态,另一为奇宇称态.

〔8〕 Loudon R. Am. J. Phys., 1957, **27**: 649.

在 $x>0$ 区(透射波)

$$\psi(x) \sim e^{ikx} \frac{1}{\Gamma(1+i/k)} \frac{1}{2ik}(2ikx)^{i/k} G(1-i/k, -i/k, 2ikx)$$

$$\xrightarrow{x\to\infty} e^{ikx} \frac{1}{\Gamma(1+i/k)} \cdot \frac{1}{2ik}(2ikx)^{i/k}. \tag{12}$$

解析延拓到 $E<0$(复 k 平面),令 $k=i\beta, \beta=\sqrt{-2E}$,则散射波幅极点位置由 $\Gamma(1-1/\beta)=0$ 确定.所以 $1-1/\beta=0, -1, -2, \cdots$,即 $1/\beta=n, n=1,2,3,\cdots$,而

$$E = -\frac{1}{2}\beta^2 = -1/2n^2, \quad n = 1,2,3,\cdots, \tag{13}$$

此即一维氢原子的能级公式(基态除外,一维氢原子基态能量 $E_0=-\infty$),与根据束缚态边条件直接求解能量本征方程所得结果相同[2][8].一维氢原子能级公式(除基态外),与三维氢原子相同.但每条能级(除基态外)都是二重简并,一为偶宇称态,另一为奇宇称态.

---

[8] Loudon R. Am. J. Phys., 1957, **27**:649.